اکائی 4

کیمیائی بندش اور سالماتی ساخت
(Chemical Bonding and Molecular Structure)

"سائنسداں مسلسل نئے مرکبات دریافت کر رہے ہیں، ان سے متعلق حقائق کو سلسلے وار ترتیب دے رہے ہیں، موجودہ علم کی بنیاد پر وضاحت کرنے کی کوشش کر رہے ہیں یا ابتدائی نظریات کو بہتر طور پر مرتب کر رہے ہیں یا مشاہدہ کیے گئے نئے حقائق کی وضاحت کے لیے نظریات کی تشکیل کر رہے ہیں۔"

مقاصد

اس سبق کو پڑھنے کے بعد آپ اس لائق ہو جائیں گے کہ:

- کیمیائی بندش کے کوسل-لیوس نظریے کو سمجھ سکیں؛
- آکٹیٹ قاعدے (Octate) کی وضاحت کر سکیں اور اس کی حدود بیان کر سکیں۔ سادہ سالموں کے لیے لیوس ساخت بنا سکیں؛
- مختلف قسم کے بند کی تشکیل کے عمل کو سمجھا سکیں؛
- وی ایس ای پی آر (VSEPR) نظریے کو بیان کر سکیں اور سادہ سالموں کی جیومیٹری کی پیشین گوئی کر سکیں؛
- شریک گرفت بندش کے لیے ویلنس بانڈ طریقہ کار کی وضاحت کر سکیں؛
- شریک گرفت بندش کی سمتی خصوصیات کی پیشین گوئی کر سکیں؛
- s-، p- اور d- اربٹل کی شمولیت سے ہائبرائڈائزیشن (Hybridisation) کی مختلف اقسام کی وضاحت کر سکیں اور سادہ شریک گرفت سالموں کی شکل بنا سکیں؛
- ائسونیوکلیر دو ایٹمی سالموں کے سالماتی اربٹل نظریہ (Molecular Orbital Theory) کو بیان کر سکیں؛
- ہائڈروجن بند کے تصور کی وضاحت کر سکیں۔

مادہ ایک یا مختلف قسم کے عناصر سے مل کر بنتا ہے۔ عام حالات میں نوبل گیسوں کے علاوہ اور کوئی عنصر قدرت میں آزاد حالت میں نہیں پایا جاتا ہے۔ تاہم ایٹموں کا ایک مجموعہ ایک نوع کی قسم میں نمایاں خاصیتوں کے ساتھ پایا جاتا ہے۔ ''ایٹموں کے ایسے گروپ کو سالمہ (Molecular) کہتے ہیں۔ ظاہر ہے کہ ایک سالمے میں ایٹموں کو باندھنے کے لیے کوئی قوت درکار ہوگی **وہ قوت کشش جو مختلف اجزا (ایٹم، آین وغیرہ) کو مختلف کیمیائی انواع میں ایک ساتھ باندھے رکھتی ہے، کیمیائی بند کہلاتا ہے۔''** چونکہ ایک کیمیائی مرکب کی تشکیل مختلف عناصر کے علیحدہ علیحدہ طریقوں سے ملنے کے نتیجہ میں ہوتی ہے۔ ایٹم کیوں متحد ہوتے ہیں؟ کچھ مخصوص اتحاد ہی کیوں ممکن ہیں؟ ایسا کیوں ہے کہ کچھ ایٹم متحد ہوتے ہیں اور کچھ نہیں؟ سالمات کی مخصوص ساخت کیوں ہوتی ہے؟ ان سوالات کا جواب دینے کے لیے وقتاً فوقتاً مختلف تصورات اور نظریات پیش کیے گئے ہیں۔ یہ کوسل-لیوس اپروچ، ویلنس شیل الیکٹران پیئر رپلشن تھیوری (VSEPR)، ویلنس بونڈ (VB) تھیوری اور مولیکولر آربٹل (MO) تھیوری ہیں۔ بندش کے مختلف نظریات کا ارتقاء اور کیمیائی بندش کی نوعیت کی وضاحت کا قریبی تعلق ایٹم کی ساخت، عناصر کا الیکٹرانی تشکل اور دوری جدول کی سمجھ پیدا کرنے کی کوششوں سے ہے۔ ہر نظام کی کوشش زیادہ مستحکم رہنے کی ہوتی ہے اور بندش نظام کو استحکام فراہم کرنے کے لیے توانائی کو کم کرنے کا ایک قدرتی طریقہ ہے۔

4.1 کیمیائی بندش کے لیے کوسیل-لیوس کا طریقۂ کار (Kossel-Lewis Approach to Chemical Bonding)

الیکٹران کی اصطلاح میں کیمیائی بندش کی تشکیل کی وضاحت کے لیے متعدد کوششیں کی گئی ہیں لیکن یہ صرف 1916 میں ممکن ہوا جب کوسیل اور لیوس نے آزادانہ طور پر ایک تسلّی بخش وضاحت پیش کرنے میں کامیابی حاصل کی۔ وہ پہلے شخص تھے جنھوں نے نوبل گیسوں کی غیر عاملیت کی بنیاد پر بندش کی منطقی وضاحت پیش کی۔

لیوس نے ایٹم کی تصویر پیش کی جس کے مطابق مثبت چارج شدہ 'Kernel' (نیوکلیس اور اندرونی الیکٹران) ہوتا ہے اور بیرونی شیل میں زیادہ سے زیادہ آٹھ الیکٹران سما سکتے ہیں۔ اس نے مزید یہ تصور کیا کہ یہ آٹھ الیکٹران مکعب کے آٹھ کونوں کو گھیرتے ہیں جو 'Kernel' کو گھیرے ہوئے ہے۔ اس طرح سوڈیم کا باہری خول کا واحد الیکٹران مکعب کے ایک کونے کو گھیرے گا، جبکہ گیس میں آٹھوں کونے گھِرے ہوئے ہوں گے۔ الیکٹرانوں کا یہ آکٹیٹ (Octet) ایک مخصوص مستحکم الیکٹرانی تشکل کو ظاہر کرتا ہے۔ ''لیوس نے مزید یہ بھی دعویٰ کیا کہ ایٹم اس وقت **مستحکم آکٹیٹ حاصل کرلیتے ہیں جب وہ کیمیائی بند کے ذریعے جُڑے ہوئے ہوتے ہیں۔**'' سوڈیم اور کلورین کے معاملے میں یہ ایک الیکٹران کی منتقلی کی شکل میں ہوسکتا ہے جب سوڈیم کا ایک الیکٹران کلورین پر منتقل ہو جاتا ہے اور Na^+ اور Cl^- آین بنتے ہیں۔ دوسرے سالموں جیسے H_2، Cl_2، F_2 وغیرہ میں دو ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران کے جوڑے کے اشتراک سے بند بنتا ہے۔ اس عمل میں ہر ایٹم **الیکٹرانوں کے باہری مستحکم آکٹیٹ** حاصل کر لیتا ہے۔

لیوئس علامتیں: سالمہ کے بننے کے دوران کیمیائی اتحاد میں صرف باہری الیکٹران ہی حصّہ لیتے ہیں اور وہ گرفتی الیکٹران (Valence Eletron) کہلاتے ہیں۔ اندرونی الیکٹران کافی محفوظ ہوتے ہیں اور عام طور پر اتحادی عمل میں حصّہ نہیں لیتے۔ جی۔این۔ لیوئس، امریکی کیمیاداں نے ایٹم میں گرفتی الیکٹرانوں کو ظاہر کرنے کا آسان طریقہ بتایا۔ یہ اظہار **لیوئس علامتیں** کہلاتا ہے۔ مثال کے طور پر دوسرے دور کے عناصر کی لیوس علامتیں مندرجہ ذیل ہیں۔

Li· ·Be· ·B· ·C· ·N· :O: :F: :Ne:

لیوئس علامات کی اہمیت: علامت کے اردگرد نقطوں کی تعداد ویلنس الیکٹرانوں کی تعداد کو ظاہر کرتی ہے۔ ویلنس الیکٹرانوں کا یہ عدد عناصر کی عام یا **گروپ ویلنس** معلوم کرنے میں مدد کرتا ہے۔ عناصر کا گروپ ویلنس عام طور پر لیوئس علامت میں نقطوں کی تعداد کے برابر یا آٹھ میں سے نقطوں یا ویلنس الیکٹرانوں کی تعداد گھٹانے پر حاصل شدہ عدد کے برابر ہوتا ہے۔

کیمیائی بندش سے متعلق کوسل نے مندرجہ ذیل حقائق کی سمت توجہ دلائی:

- دوری جدول میں بہت زیادہ برقی منفی ہیلوجن اور بہت زیادہ برقی مثبت قلوی دھاتیں نوبل گیسوں کے ذریعہ جُدا کی گئی ہیں۔
- ہیلوجن ایٹم سے منفی آین کے بننے اور قلوی دھات سے ایک مثبت آین بننے کا تعلق متعلقہ ایٹموں کے ذریعہ الیکٹران حاصل کرنے یا گنوانے سے ہے۔
- اس طرح بننے والے منفی اور مثبت آین مستحکم نوبل گیسوں کا الیکٹرانی تشکل حاصل کر لیتے ہیں۔ نوبل گیسوں میں (ہیلیم کے علاوہ جس میں صرف دو الیکٹران ہوتے ہیں) خاص طور پر آٹھ الیکٹرانوں (Octet) کا مستحکم تشکل پایا جاتا ہے۔
- منفی اور مثبت آین برقی سکونی کشش (Electrostatic Attraction) کے ذریعہ قائم رہتے ہیں۔

مثال کے طور پر مندرجہ بالا اسکیم کے تحت سوڈیم اور کلورین سے سوڈیم کلورائڈ کا بننا اس طرح واضح کیا جاسکتا ہے:

$$Na \rightarrow Na^+ + e^-$$
$$[Ne]\,3s^1 \qquad [Ne]$$
$$Cl + e^- \rightarrow Cl^-$$
$$[Ne]\,3s^2\,3p^5 \qquad [Ne]\,3s^2\,3p^6 \text{ or } [Ar]$$
$$Na^+ + Cl^- \rightarrow NaCl \text{ or } Na^+Cl^-$$

اسی طرح CaF_2 کا بننا بھی مندرجہ ذیل طریقے سے دکھایا جاسکتا ہے:

$$Ca \rightarrow Ca^{2+} + 2e^-$$
$$[Ar]\,4s^2 \qquad [Ar]$$
$$F + e^- \rightarrow F^-$$
$$[He]\,2s^2\,2p^5 \qquad [He]\,2s^2\,2p^6 \text{ or } [Ne]$$
$$Ca^{2+} + 2F^- \rightarrow Ca^{2+}(F^-)_2 \text{ or } CaF_2$$

''مثبت اور منفی آین کے درمیان برقی سکونی کشش کے نتیجے میں بننے والا بند برقی گرفت بند **(Electrovalent Bond)** کہلاتا ہے۔ اس طرح برقی گرفت **(Electro Valence)** آین پر اکائی چارج کی تعداد کے برابر ہوتی ہے۔'' اس طرح کیلشیم کو مثبت الیکٹرو ویلنس دو اور کلورین کو منفی الیکٹرو ویلنس دیا جاتا ہے۔

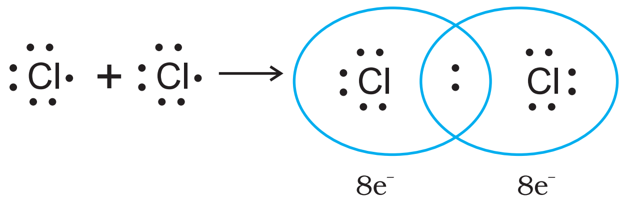
کوسل کے اصول مسلمہ (Poslutates) الیکٹران کی منتقلی کے ذریعہ آین بنے اور آینی قلمی مرکبات بننے سے متعلق جدید تصورات کے لیے بنیاد فراہم کرتے ہیں۔ آینی مرکبات کو سمجھنے اور انہیں منظّم کرنے میں اس کے خیالات بہت اہم ثابت ہوئے ہیں۔ اس کے ساتھ ہی اس نے اس حقیقت کو بھی تسلیم کیا ہے کہ مرکبات کی ایک بڑی تعداد ان تصورات میں فٹ نہیں ہوتی۔

4.1.1 آکٹیٹ کا قاعدہ (Octet Rule)

1916 میں کوسل اور لیوئس نے ایٹموں کے درمیان کیمیائی اتحاد کا ایک اہم نظریہ پیش کیا ہے جسے کیمیائی بندش کا الیکٹرانی نظریہ کہتے ہیں۔ اس کے مطابق ایک ایٹم دوسرے ایٹم کو گرفتی الیکٹران (Valence Electron) منتقل کر کے (حاصل کر کے یا گنوا کر) اتحاد کر سکتے ہیں یا گرفتی الیکٹرانوں کا ساجھا کر سکتے ہیں تا کہ وہ اپنے گرفتی خول میں آکٹیٹ قائم کر سکیں۔ یہ **آکٹیٹ قاعدہ** کہلاتا ہے۔

4.1.2 شریک بندش بند (Covalent Bond)

لینگموئیر (1919) نے لیوئس کے اصول مسلّمہ کو بہتر بنانے کے لیے آکٹیٹ کے ساکن مکعبی ترتیب کے تصور کو رد کر کے **شریک گرفت بند (Covalent Bond)** کی اصطلاح پیش کی۔ لیوئس-لینگموئیر نظریے کو کلورین کے سالمہ Cl_2 کے بننے کے عمل کے ذریعہ سمجھا جا سکتا ہے۔ Cl ایٹم جس کا الیکٹرانی تشکل $[Ne]3s^23p^5$ ہے آرگن (Ar) کے الیکٹرانی تشکل سے ایک الیکٹران کم ہے۔ کلورین (Cl_2) سالمہ کے بننے کے عمل کو اس طرح سمجھا جا سکتا ہے کہ دو کلورین ایٹم ایک الیکٹران کے جوڑے کا ساجھا کر لیتے ہیں، ہر کلورین ایٹم اس جوڑے کو اپنا ایک الیکٹران دے رہا ہے۔ نتیجہ کے طور پر دونوں کلورین ایٹم اپنے نزدیک ترین نوبل گیس (یعنی آرگن) بیرونی شیل آکٹیٹ حاصل کر لیتے ہیں۔



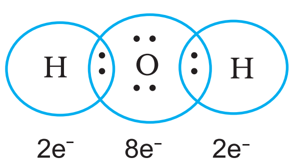
Cl – Cl یا

دو کلورین ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بند

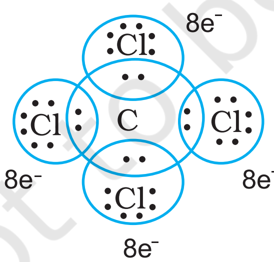
''**یہ نقطے الیکٹران کو ظاہر کرتے ہیں۔ اس طرح کی ساخت کو لیوئس ڈاٹ ساخت کہا جاتا ہے۔**''

لیوئس ڈاٹ ساخت دوسرے سالموں کے لیے بھی لکھے جا سکتے ہیں جن میں متحد ہونے والے ایٹم مماثل یا مختلف ہو سکتے ہیں۔ ضروری حالات یہ ہیں کہ:

- ہر ایک بند ایٹموں کے درمیان الیکٹران کے جوڑے میں ساجھے کے نتیجے میں بنتا ہے۔
- متحد ہونے والا ہر ایک ایٹم اس ساجھے کے جوڑے میں کم از کم ایک الیکٹران کی حصہ داری کرتا ہے۔
- الیکٹران کی شرکت کے نتیجے میں متحد ہونے والے ایٹم نوبل گیس کے بیرونی شیل کا تشکل حاصل کر لیتے ہیں۔
- اس طرح پانی اور کاربن ٹیٹرا کلورائیڈ میں شریک گرفت بند کی تشکیل کو مندرجہ ذیل طریقے سے دکھایا جا سکتا ہے۔



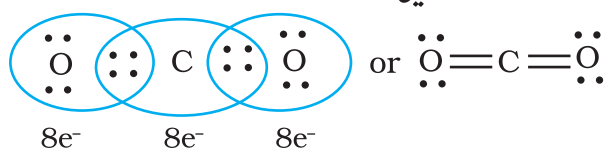
H ایٹم الیکٹران کا ڈپلیٹ اور O آکٹیٹ اختیار کرتے ہیں۔



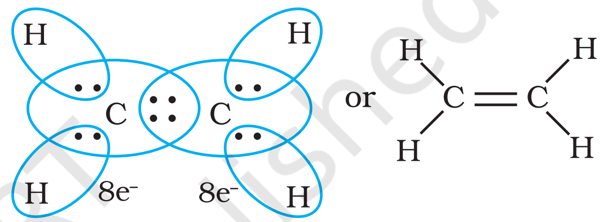
چار Cl ایٹم میں سے ہر ایک Cl اور C ایٹم الیکٹران کا آکٹیٹ اختیار کرتے ہیں۔

''**اس طرح جب دو ایٹم اپنے درمیان الیکٹران کے ایک جوڑے میں شرکت کرتے ہیں تو وہ واحد شریک گرفت بند کے ذریعہ جڑے ہوئے ہوتے ہیں۔**'' بہت سے مرکبات میں ایٹموں کے درمیان کثیر بند ہوتے ہیں۔ دو ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران جوڑے سے زیادہ کی شرکت سے کثیر بند بنتے ہیں۔' **اگر دو ایٹموں کے درمیان دو الیکٹران جوڑے**

مشترک ہیں تو ان کے درمیان شریک گرفت بند دوہرا بند (Double Bond) کہلائے گا، مثال کے طور پر کاربن ڈائی آکسائڈ کے سالمے میں ہمارے پاس کاربن اور آکسیجن کے درمیان دوہرے بند ہوتے ہیں۔ اسی طرح ایتھین کے سالمے میں دو کاربن ایٹم دوہرے بند کے ذریعہ بندھے ہوئے ہوتے ہیں۔

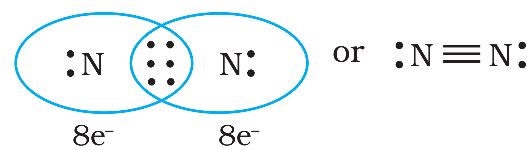


CO_2 سالمے میں دوہرا بند

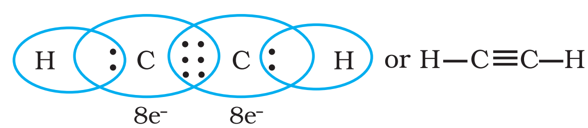


C_2H_4 سالمہ

جب ساجھا کرنے والے ایٹم تین الیکٹران جوڑوں میں شرکت کرتے ہیں جیسا کہ دو نائٹروجن ایٹم ایک نائٹروجن سالمے میں یا دو کاربن ایٹم ایک ایتھائین کے سالمے میں تو ایک تہرا بند (Triple Bond) بنتا ہے۔



N_2 سالمہ



C_2H_2 سالمہ

4.1.3 سادہ سالموں کا لیوئس اظہار (لیوئس ساخت) [Lewis Representation of Simple Molecules (the Lewis Structures)]

لیوئس ڈاٹ ساخت سالموں اور آینوں میں مشترک الیکٹران جوڑوں اور آکٹیٹ قاعدے کی اصطلاح میں بندش کی تصویر مہیا کرتے ہیں۔ اگرچہ یہ شکل سالمے کی بندش اور خصوصیات کو مکمل طور پر واضح نہ کر سکتی ہو پھر بھی یہ کسی حد تک سالمے کے بننے اور اس کی خصوصیات کو سمجھنے میں مدد کرتی ہے۔ لہٰذا سالمے کا لیوئس ڈاٹ ساخت لکھنا بہت فائدے مند ہوتا ہے۔ مندرجہ ذیل اقدامات کی مدد سے لیوئس ڈاٹ ساخت لکھی جا سکتی ہیں۔

- ساخت لکھنے کے لیے درکار الیکٹرانوں کی کل تعداد کو اتحادی ایٹموں کے گرفتی الیکٹرانوں کو جمع کر کے حاصل کیا جاتا ہے۔ مثال کے طور پر CH_4 سالمے میں بندش کے لیے 8 گرفتی الیکٹران دستیاب ہیں (چار کاربن سے اور 4 ہائڈروجن کے چار ایٹموں سے)۔
- این آین کے لیے ہر ایک منفی چارج کا مطلب ہے ایک الیکٹران کا داخل ہونا۔ کیٹ آین کے لیے ہر مثبت چارج کے لیے گرفتی الیکٹرانوں کی کل تعداد میں سے ایک الیکٹران گھٹایا جائے گا۔ مثال کے طور پر CO_3^{2-} آین کے لیے دو منفی چارج کا مطلب ہے تعدیلی ایٹموں کے ذریعے مہیّا کیے گئے الیکٹرانوں کے علاوہ دو الیکٹران زائد ہیں۔ NH_3^+ آین کے لیے ایک مثبت چارج کا مطلب ہے کہ تعدیلی ایٹموں کے گروپ میں سے ایک الیکٹران کم ہو گیا۔
- متحد ہونے والے ایٹموں کی کیمیائی علامتیں جانتے ہوئے اور مرکب کے ساختی ڈھانچہ کا علم رکھتے ہوئے (جانتے ہوئے یا اندازہ کرتے ہوئے) الیکٹران کی کل تعداد کو ایٹموں کے درمیان کل بند کے تناسب میں مشترک گرفتی جوڑوں کو تقسیم کرنا آسان ہو جاتا ہے۔
- عام طور پر کسی سالمے/آین میں برقی منفی ایٹم مرکزی مقام پر رہتا ہے۔ مثال کے طور پر NF_3 اور CO_3^{2-} میں نائٹروجن اور کاربن مرکزی ایٹم ہیں جبکہ کلورین اور آکسیجن کا مقام سروں پر ہے۔
- اکہرے بند میں مشترک الیکٹران جوڑوں کی تقسیم کے بعد باقی ماندہ الیکٹرانوں کے جوڑے کثیر بندش میں استعمال ہو جاتے ہیں یا تنہا جوڑے (Lone Pair) کی حیثیت سے باقی رہتے ہیں بنیادی ضرورت تو یہ ہے کہ ہر بندشی ایٹم کے پاس آٹھ الیکٹران ہوں۔

جدول 4.1 میں کچھ سالموں/آینوں کے لیوئس نمونے پیش کیے گئے ہیں۔

جدول 4.1 کچھ سالموں کے لیوئس نمونے

سالمے/آئن		لیوئس اظہار
H_2	H : H*	H – H
O_2	:Ö::Ö:	:Ö=Ö:
O_3	$\ddot{O}^+$; :Ö: :Ö:$^-$	:O=Ö$^+$–Ö:$^-$
NF_3	:F̤: N̤ :F̤: ; :F̤:	:F̤–N̤–F̤: ; :F̤:
CO_3^{2-}	[:Ö: C :Ö: ; :O:]$^{2-}$	[:Ö–C(=O:)–Ö:]$^{2-}$
HNO_3	Ö:: N$^+$:Ö: H ; :Ö:$^-$	Ö =N$^+$–Ö–H ; :Ö:$^-$

* ہائڈروجن کاھر ایک ایٹم، ہیلیم کا تشکل اختیار کرتا ہے۔ (الیکٹرانوں کا ڈپلیٹ)

مسئلہ 4.1

CO کے لیے لیوئس ڈاٹ ساخت لکھیے

حل

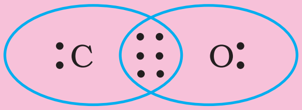
قدم 1: کاربن اور آکسیجن ایٹموں کے کُل گرفتی الیکٹرانوں کی تعداد معلوم کیجیے۔ کاربن اور آکسیجن کے باہری (گرفتی) خول تشکل بالترتیب اس طرح ہیں $2s^2\ 2p^2$ اور $2s^2\ 2p^4$۔ دستیاب گرفتی الیکٹران ہیں $4 + 6 = 10$۔

قدم 2: CO کا ساختی ڈھانچہ اس طرح لکھا جائے گا: C O

قدم 3: C اور O کے درمیان اکہری بندش (ایک مشترک الیکٹرانوں کا جوڑا) بنائیے اور O پر آکٹیٹ مکمل کیجیے۔ باقی ماندہ دو الیکٹران C پر تنہا جوڑا ہے۔

:C :Ö: or :C — Ö:

یہ کاربن کے آکٹیٹ کو مکمل نہیں کرتی لہٰذا ہمیں C اور O کے درمیان کثیر بندش کی ضرورت ہوتی ہے (اس معاملے میں ایک تہری بندش) یہ دونوں ایٹموں کے لیے آکٹیٹ قاعدے کے اصول کو پورا کرتا ہے۔



or :C≡O:

مسئلہ 4.2

نائٹرائٹ آین کے لیے لیوئس ساخت بنائیے۔

حل

قدم 1: نائٹروجن ایٹم، آکسیجن ایٹم اور مزید ایک منفی چارج کے لیے کل گرفتی الیکٹرانوں کی تعداد شمار کیجیے۔

$N(2s^2\ 2p^3),\ O\ (2s^2\ 2p^4)$

$5 + (2 \times 6) + 1 = 18$ الیکٹران

قدم 2: NO_2^- کا ساختی ڈھانچہ اس طرح لکھا جائے گا:

O N O

قدم 3: نائٹروجن اور ہر ایک آکسیجن کے درمیان اکہرا بند (ایک مشترک الیکٹران جوڑا) بنائیے کہ آکسیجن ایٹم کا آکٹیٹ مکمل ہو جائے۔ یہ پھر بھی نائٹروجن کے آکٹیٹ کو مکمل نہیں کرے گا اگر باقی دو الیکٹران اس پر تنہا جوڑے کی شکل میں ہوں گے۔

[:Ö: :N: :Ö:]$^-$

لہٰذا ہمیں نائٹروجن اور ایک آکسیجن کے درمیان کثیر بندش بنانی ہوگی (یہاں دوہری بندش) اس طرح مندرجہ ذیل لیوئس ڈاٹ ساخت حاصل ہوگی۔

[Ö::N̈: Ö:]$^-$

or

[Ö= N̈ —Ö:]$^-$ or [:Ö— N̈ =Ö]$^-$

4.1.4 فارمل چارج (Formal Charge)

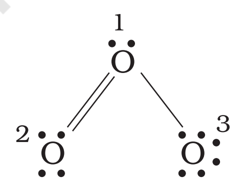
لیوئس ڈاٹ ساخت عام طور پر سالموں کی اصل شکل کو ظاہر نہیں کرتے۔ کثیر ایٹمی آینوں میں چارج کُل آین پر ہوتا ہے نہ کہ کسی ایک ایٹم پر۔ لہٰذا یہ ممکن ہے کہ ہر ایک ایٹم کو ایک فارمل چارج دیا جائے۔ ایک کثیر ایٹمی سالمے یا آین میں کسی ایٹم کا فارمل چارج تنہا یا آزاد حالت میں اس ایٹم

کے گرفتی الیکٹرانوں اور لیوئس ساخت میں اس کو دیے گئے الیکٹرانوں کے فرق کے برابر ہوتا ہے۔ اسے اس طرح ظاہر کرتے ہیں:

لیوئس ساخت میں کسی ایٹم پر فارمل چارج = [آزاد ایٹم پر گرفتی الیکٹرانوں کی کل تعداد] − [غیر بندشی (تنہا جوڑے) کے الیکٹرانوں کی کل تعداد] − (1/2) [بندشی الیکٹرانوں (مشترک) کی کل تعداد]

یہ شمار اس مفروضے پر کیا جاتا ہے کہ سالمے میں ایٹم ہر ایک مشترک جوڑے میں سے ایک الیکٹران اور تنہا جوڑے کے دونوں الیکٹرانوں کا مالک ہے۔

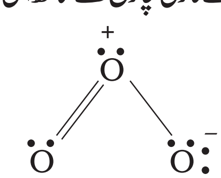
آیئے اوزون سالمے کو دیکھتے ہیں۔ O_3 کی لیوئس ساخت اس طرح لکھی جاسکتی ہے۔



ایٹموں کو 1، 2 اور 3 عدد دیے گئے ہیں۔

- درمیانی O ایٹم کو 1 عدد دیا گیا ہے
  $= 6 - 2 - \frac{1}{2}(6) = +1$
- سِرے پر O جسے 2 نشان دیا گیا ہے
  $= 6 - 4 - \frac{1}{2}(4) = 0$
- سرے پر O جسے 3 نشان دیا گیا ہے
  $= 6 - 6 - \frac{1}{2}(2) = -1$

لہٰذا ہم O_3 کو اس کے فارمل چارج کے ساتھ اس طرح ظاہر کرتے ہیں:



ہمیں یہ سمجھنا چاہیے کہ فارمل چارج سالمے کے اندر چارج کی علیحدگی کو ظاہر نہیں کرتے۔ لیوئس ساخت میں چارج ظاہر کرنے سے صرف سالمے کے اندر ویلنس الیکٹرانوں کا مقام معلوم کرنے میں مدد ملتی ہے۔ فارمل چارج کسی نوع کی ممکنہ مختلف لیوئس ساختوں میں سے سب سے کم توانائی والی ساخت کو چُننے میں مدد کرتا ہے "عام طور پر سب سے کم توانائی والی ساخت وہ ہوتی ہے جس میں ایٹم کے اوپر سب سے چھوٹے (کم) فارمل چارج ہوں۔ فارمل چارج ایک ایسا عامل ہے جس کی بنیاد بندش کے خالص تصور پر ہوتی ہے جہاں الیکٹران کے جوڑے کا اشتراک آس پاس کے ایٹموں کے مابین مساوی طور پر ہوتا ہے۔

4.1.5 آکٹیٹ قاعدے کی حدود (Limitation of the Octet Rule)

آکٹیٹ قاعدہ اگرچہ مفید ہے پھر بھی آفاقی نہیں ہے۔ زیادہ تر نامیاتی مرکبات کی ساختیں سمجھنے میں یہ کافی مفید ہے اور یہ زیادہ تر دوری جدول کے دوسرے دور کے لیے خاص طور پر استعمال ہوتا ہے۔ آکٹیٹ کلیہ کے تین قسم کے استثنیٰ ہیں۔

مرکزی ایٹم کا نا مکمل آکٹیٹ (The incomplete octet of the central atom)

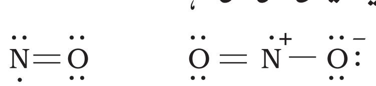
کچھ مرکبات میں مرکزی ایٹم کے گرد الیکٹرانوں کی تعداد آٹھ سے کم ہوتی ہے۔ یہ خاص طور پر ان عناصر کے ساتھ ہوتا ہے جن میں ویلنس الیکٹران کی تعداد چار سے کم ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر LiCl، BeH_2 اور BCl_3 وغیرہ۔



Li، Be اور B کے پاس بالترتیب 1، 2 اور 3 گرفتی الیکٹران ہوتے ہیں۔ اس قسم کے کچھ اور مرکبات $AlCl_3$ اور BF_3 ہیں۔

طاق الیکٹران سالمے (Odd-electron Molecules)

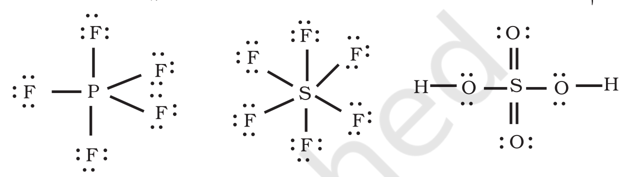
وہ سالمے جن میں الیکٹران کی تعداد طاق ہوتی ہے جیسا کہ نائٹرک آکسائڈ NO اور نائٹروجن ڈائی آکسائڈ NO_2 میں آکٹیٹ قاعدہ تمام ایٹموں کے لیے اطمینان بخش نہیں ہے۔



توسیعی آکٹیٹ (The Expanded Octet)

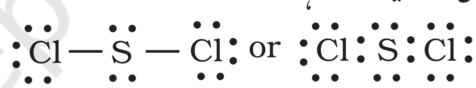
دوری جدول میں تیسرے دور اور اس کے بعد کے عناصر میں $3s$– اور $3p$– اربٹل کے علاوہ بندش کے لیے $3d$ اربٹل بھی دستیاب ہیں۔ ان عناصر کے بہت سے مرکبات میں مرکزی عنصر کے پاس 8 سے زیادہ گرفتی الیکٹران ہوتے ہیں۔ اسے توسیعی آکٹیٹ کہتے ہیں۔ ظاہر ہے کہ ان مثالوں میں آکٹیٹ قاعدہ استعمال نہیں ہوتا۔

ایسے مرکبات کی چند مثالیں PF_5، SF_6، H_2SO_4 اور بہت سے ہم ربط مرکبات (Coordination Compund) ہیں۔



PF_5 — P کے گرد 10 الیکٹران
SF_6 — S کے گرد 12 الیکٹران
H_2SO_4 — S کے گرد 12 الیکٹران

دلچسپ بات یہ ہے کہ، سلفر ایسے بہت سے مرکبات بناتا ہے جن میں آکٹیٹ قاعدہ کا استعمال ہوتا ہے۔ سلفر ڈائی کلورائڈ میں سلفر کے گرد الیکٹرانوں کا آکٹیٹ ہوتا ہے۔



آکٹیٹ نظریے کی دیگر خامیاں (Other Drawbacks of the Octet Theory)

- یہ واضح ہے کہ آکٹیٹ قاعدہ کی بنیاد نوبل گیسوں کی غیر عاملیت ہے۔ تاہم کچھ نوبل گیسیں (مثلاً زینان اور کرپٹان) بھی آکسیجن اور فلورین کے ساتھ مل کر بہت سے مرکبات جیسے KrF_2، XeF_2، $XeOF_2$ وغیرہ بناتی ہیں۔
- یہ نظریہ سالمے کی ساخت کی وضاحت نہیں کرتا۔
- یہ سالموں کے اضافی استحکام کی وضاحت نہیں کرتا اور سالموں کی توانائی کے بارے میں خاموش ہے۔

4.2 آینی یا برق گرفتی بند (Ionic or Electrovalent Bond)

آینی بند بننے کے سلسلے میں کوسل اور لیوئس ٹریٹمنٹ سے یہ معلوم ہوتا ہے کہ بنیادی طور پر آینی مرکبات بننے کا انحصار مندرجہ ذیل پر ہوگا۔

- تعدیل ایٹموں سے ان کے مثبت اور منفی آین بننے میں آسانی؛
- ٹھوس میں مثبت اور منفی آین کی ترتیب، یعنی قلمی مرکبات کی لیٹس (Lattice)۔

مثبت آین کے بننے میں آئیونائزیشن شامل ہوتا ہے یعنی ایک تعدیلی ایٹم سے الیکٹران کا خارج ہونا اور منفی آین کے لیے تعدیلی ایٹم میں الیکٹران کا شامل ہونا۔

$M(g) \rightarrow M^+(g) + e^-$;
آئیونائزیشن اینتھالپی

$X(g) + e^- \rightarrow X^-(g)$;
الیکٹران گین اینتھالپی

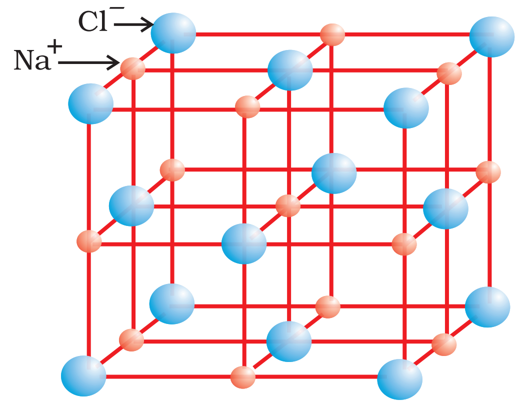
$M^+(g) + X^-(g) \rightarrow MX(s)$

الیکٹران گین اینتھالپی، $\Delta_{eg}H$ اینتھالپی کی وہ تبدیلی (اکائی 3) ہوتی ہے کہ جب گیسی حالت میں ایٹم اپنی گراؤنڈ اسٹیٹ میں ایک الیکٹران حاصل کرتا ہے۔ الیکٹران گین کا عمل حرارت زا (Exothermic) ہوسکتا ہے۔ آئیونائزیشن، دوسری طرف، صرف حرارت خور (Endothermic) ہوتا ہے۔ الیکٹران ایفینٹی الیکٹران گین کے ساتھ شامل منفی توانائی تبدیل ہوتی ہے۔

''ظاہر ہے کہ آینی بندش ان عناصر میں زیادہ آسانی سے ہوگی جن کی آئیونائزیشن اینتھالپی نسبتاً کم ہوگی اور وہ عناصر جن کی الیکٹران گین اینتھالپی کی منفی قدر نسبتاً زیادہ ہوگی۔

زیادہ تر آینی مرکبات میں مثبت آین دھاتی عناصر سے اور منفی آین غیر دھاتی عناصر سے حاصل ہوتے ہیں۔ امونیم آین (دو غیر دھاتی عناصر سے مل کر بنتا ہے) ایک استثنٰی ہے۔ یہ بہت سے آینی مرکبات کے کیٹ آین بناتا ہے۔

قلمی حالت میں آینی مرکبات میں کیٹ آین اور این آین آپس میں کولمبی باہمی عمل توانائیوں (Coulombic Interation Energies) کے ذریعہ جُڑ کر سہ ابعادی ترتیب میں پائے جاتے ہیں۔ یہ مرکبات مختلف قلمی ساختوں میں کرسٹلائز ہوتے ہیں جس کا انحصار آین کے سائز، پیکنگ کی ترتیب اور دوسرے عوامل پر ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر $NaCl$، سوڈیم کلورائڈ کا قلمی ڈھانچہ نیچے دکھایا گیا ہے۔



چٹانی نمک کی ساخت

آینی ٹھوس میں الیکٹران گین اینتھالپی اور آیونائزیشن اینتھالپی کی کُل مقدار مثبت ہوسکتی ہے لیکن قلمی ساخت کرسٹل لیٹس بننے کے دوران خارج ہونے والی توانائی کی وجہ سے ہی مستحکم ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر Na(g) سے $Na^+(g)$ بننے کے دوران آیونائزیشن اینتھالپی 495.8 kJ mol^{-1} ہوتی ہے؛ جبکہ $Cl\ (g) + e^- \rightarrow Cl^-(g)$ تبدیلی کے لیے الیکٹران گین اینتھالپی صرف -348.7 kJ mol^{-1} ہی ہے۔ دونوں کی کُل توانائی 147.1 kJ mol^{-1}، NaCl(s) کی لیٹس تشکیل کی اینتھالپی (-788 kJ mol^{-1}) سے کہیں زیادہ ہے۔ لہٰذا اس عمل میں خارج ہونے والی توانائی جذب ہونے والی توانائی سے زیادہ ہے۔ **لہٰذا ایک آینی مرکب لیٹس استحکام کے لیے کیفیتی پیائش اس کی لیٹس تشکیل کی اینتھالپی کے ذریعہ فراہم کیے جاتے ہیں نہ کہ صرف گیسی حالت میں آینی انواع کے گرد الیکٹرانوں کے آکٹیٹ حاصل کرکے۔**

چونکہ لیٹس اینتھالپی آینی مرکبات کی تشکیل میں اہم کردار ادا کرتی ہے، یہ ضروری ہے کہ ہم اس کے بارے میں مزید معلومات حاصل کریں۔

4.2.1 لیٹس اینتھالپی (Lattice Enthalpy)

کسی آینی ٹھوس کی لیٹس اینتھالپی کی تعریف اس توانائی کی شکل میں کی جاتی ہے جو ایک مول ٹھوس آینی مرکب کو اس کے گیسی آینوں میں مکمل طور پر علیحدہ کرنے کے لیے درکار ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر NaCl کی لیٹس اینتھالپی 788 kJ mol^{-1} ہے۔ اس کا مطلب ہے کہ ایک مول ٹھوس NaCl کو ایک مول $Na^+(g)$ اور ایک مول $Cl^-(g)$ کو لامتناہی فاصلے تک علیحدہ کرنے کے لیے 788 kJ توانائی کی ضرورت ہوتی ہے۔

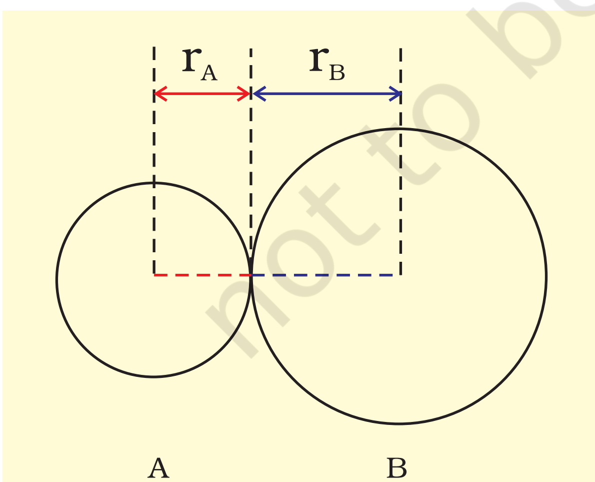
اس عمل میں مخالف چارج والے آین کے درمیان قوت کشش اور یکساں چارج والے آینوں کے درمیان دافع قوت شامل ہوتی ہے۔ چونکہ ٹھوس قلم سہ ابعادی ہوتے ہیں اس لیے یہ ممکن نہیں ہوتا کہ لیٹس کی اینتھالپی براہ راست قوتِ کشش اور دافع قوت کے باہمی عمل سے معلوم کی جاسکے۔ کرسٹل جیومیٹری سے تعلق رکھنے والے عوامل کو بھی اس میں شامل کرنا پڑے گا۔

4.3 بندشی پیرامیٹر (Bond Parameters)

4.3.1 بندشی لمبائی (Bond Length)

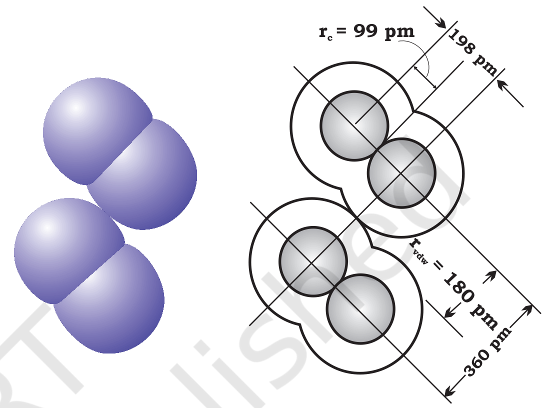
ایک سالمے میں بندھے ہوئے دو ایٹموں کے مرکزوں کے درمیان توازنی فاصلہ بندشی لمبائی کہلاتا ہے۔ بندشی لمبائی کی پیائش اسپیکٹرواسکوپی، ایکسرے ڈیفریکشن اور الیکٹران ڈیفریکشن کے طریقوں سے کی جاتی ہے جس کے بارے میں آپ اعلیٰ جماعتوں میں پڑھیں گے۔ بندشی جوڑے کا ہر ایک ایٹم بندشی لمبائی میں شریک ہوتا ہے (شکل 4.1)۔ شریک گرفت بندش میں ہر ایک ایٹم کا تعاون اس ایٹم کا شریک گرفت نصف قطر (Covalent Radius) کہلاتا ہے۔

شریک گرفت نصف قطر کی پیائش اندازاً ایک ایٹم کے مرکز کا نصف قطر ہوتی ہے جو بندشی حالت میں برابر والے ایٹم کے مرکز کے تعلق میں ہوتا ہے۔ شریک گرفت نصف قطر ایک ہی سالمے میں شریک گرفت بند سے بندھے ہوئے دو یکساں ایٹموں کے درمیانی فاصلے کا نصف حصّہ ہوتا ہے۔



شکل 4.1 شریک گرفت سالمے AB میں بندشی لمبائی
(R بندشی لمبائی ہے اور r_A اور r_B ایٹم A اور B کے شریک بندش نصف قطر ہیں) $R = r_A + r_B$

وَن ڈر والز نصف قطر ایٹم کے پورے سائز کو ظاہر کرتا ہے جس میں غیر بندشی حالت میں ان کا گرفتی خول شامل ہوتا ہے۔ مزید، وَن ڈر والز نصف قطر اس فاصلے کا آدھا حصّہ ہوتا ہے جو ایک ٹھوس کے علیحدہ سالموں میں یکساں ایٹموں کے درمیان ہوتا ہے۔ شکل 4.2 میں کلورین کے شریک گرفت اور وَن ڈر والز نصف قطر دکھائے گئے ہیں۔

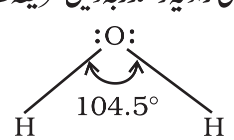


شکل 4.2 کلورین سالمے میں شریک گرفت اور وَن ڈر والز نصف قطر اندرونی دائرے کلورین ایٹم کے سائز کے مطابق ہیں (r_{vdw} اور r_c بالترتیب وَنڈروالز اور شریک گرفت نصف قطر ہیں)

جدول 4.2 میں کچھ عام اکہرے، دوہرے اور تہرے بند کی اوسط بندشی لمبائیاں دکھائی گئی ہیں۔ کچھ عام سالموں کی بندشی لمبائیاں جدول 4.3 میں دکھائی گئی ہیں۔ جدول 4.4 میں کچھ عام عناصر کے شریک گرفت نصف قطر دکھائے گئے ہیں۔

4.3.2 بندشی زاویہ (Bond Angle)

اس کی تعریف اس زاویہ کی طرح کی جاتی ہے جو کسی سالمے/پیچیدہ آین کے مرکزی ایٹم اور بندشی الیکٹران کا جوڑا رکھنے والے اربٹل کے درمیان ہوتا ہے۔ بندشی زاویے کو ڈگری میں ظاہر کرتے ہیں جو اسپیکٹرواسکوپک طریقوں سے تجرباتی طور پر معلوم کیے جاسکتے ہیں۔ یہ ہمیں کسی سالمے/پیچیدہ آین میں مرکزی ایٹم کے گرد اربٹل کی تقسیم کا اندازہ فراہم کرتے ہیں جس کی مدد سے ہمیں اس کی ساخت کا تعین کرنے میں مدد ملتی ہے۔ مثال کے طور پر پانی میں H–O–H میں بندشی زاویہ کو مندرجہ ذیل طریقہ سے ظاہر کیا جاتا ہے۔



جدول 4.2 کچھ اکہرے، دوہرے اور تہرے بند کی اوسط بندشی لمبائیاں

بند کی قسم	شریک بندش بندشی لمبائی (pm)
O–H	96
C–H	107
N–O	136
C–O	143
C–N	143
C–C	154
C=O	121
N=O	122
C=C	133
C=N	138
C≡N	116
C≡C	120

جدول 4.3 عام سالموں میں بندشی لمبائیاں

سالمہ	بندشی لمبائی (pm)
H_2 (H – H)	74
F_2 (F – F)	144
Cl_2 (Cl – Cl)	199
Br_2 (Br – Br)	228
I_2 (I – I)	267
N_2 (N ≡ N)	109
O_2 (O ≡ O)	121
HF (H – F)	92
HCl (H – Cl)	127
HBr (H – Br)	141
HI (H – I)	160

جدول 4.4 شریک بندش نصف قطر r_{cov}/(pm)*

H	37						
C	77(1)	N	74 (1)	O	66(1)	F	64
	67 (2)		65(2)		57 (2)	Cl	99
	60(3)		55(3)				
		P	110	S	104(1)	Br	114
					95(2)		
		As	121	Se	104	I	133
		Sb	141	Te	137		

* قیمتیں اکہرے بند کے لیے دی گئی ہیں، سوائے ان کے جہاں قوسین میں قیمت دی گئی ہے۔ (دوری رجحان کے لیے اکائی 3 بھی دیکھیے)

4.3.3 بانڈ اینتھالپی (Bond Enthalpy)

اس کی تعریف اس توانائی کی مقدار کی شکل میں کی جاتی ہے جو گیسی حالت میں دو ایٹموں کے درمیان ایک مخصوص قسم کے 1 مول کو توڑنے میں خرچ ہوتی ہے۔ بانڈ اینتھالپی کی اکائی $kJ\ mol^{-1}$ ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر ہائڈروجن سالمے میں H–H بانڈ اینتھالپی $435.8 kJ mol^{-1}$ ہوتی ہے۔

$$H_2(g) \rightarrow H(g) + H(g);\ \Delta_a H^\ominus = 435.8\ kJ\ mol^{-1}$$

اسی طرح ان سالموں میں جن میں کثیر بند ہوتے ہیں مثلاً O_2 اور N_2، میں بانڈ اینتھالپی اس طرح ہوگی:

$$O_2\ (O = O)\ (g) \rightarrow O(g) + O(g);\quad \Delta_2 H^\ominus = 498\ kJ\ mol^{-1}$$

$$N_2\ (N \equiv N)\ (g) \rightarrow N(g) + N(g);\quad \Delta_a H^\ominus = 946.0\ kJ\ mol^{-1}$$

یہ بات اہم ہے کہ بندشی افتراق اینتھالپی (Bond Dissociation Anthalpy) جتنی زیادہ ہوگی، اتنا ہی مضبوط بند سالمے میں ہوگا۔ ایک ہیٹرو نیوکلیرڈائی اٹامک مالیکیول (Heteronuclear Diatomic Molecule) جیسے HCl کے لیے

$$HCl\ (g) \rightarrow H(g) + Cl\ (g);\ \Delta_a H^\ominus = 431.0\ kJ\ mol^{-1}$$

کثیر ایٹمی سالموں میں بندشی توانائی کی پیمائش زیادہ پیچیدہ ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر H_2O سالمے میں دو O – H بند کو توڑنے میں یکساں توانائی کی ضرورت نہیں ہوتی۔

$$H_2O(g) \rightarrow H(g) + OH(g);\ \Delta_a H_1^\ominus = 502\ kJ\ mol^{-1}$$

$$OH(g) \rightarrow H(g) + O(g);\ \Delta_a H_2^\ominus = 427\ kJ\ mol^{-1}$$

$\Delta_a H_2^\ominus$ کی قیمتوں کا فرق بتاتا ہے کہ دوسرے O – H بند میں کیمیائی ماحول تبدیل ہونے کی وجہ سے کچھ تبدیلی آجاتی ہے۔ یہی وجہ ہے کہ مختلف سالموں جیسے C_2H_5OH (Ethanol) اور پانی کے سالموں میں یکساں O – H بند کے لیے توانائی میں فرق پایا جاتا ہے۔ لہٰذا کثیر ایٹمی سالموں میں اوسط بانڈ اینتھالپی **(Average Bond Enthalpy)** کی اصطلاح استعمال کی جاتی ہے۔ اسے حاصل کرنے کے لیے کل بندشی افتراق اینتھالپی کی اصطلاح استعمال کی جاتی ہے۔ اسے حاصل کرنے کے لیے کل بندشی افتراق انتھالپی کو ٹوٹنے والے بند کی تعداد سے تقسیم کر دیتے ہیں۔ جیسا کہ پانی کے سالمے کے لیے مندرجہ ذیل طریقہ میں سمجھایا گیا ہے۔

$$\text{اوسط بانڈ اینتھالپی} = \frac{502 + 427}{2} = 465.5\ kJ\ mol^{-1}$$

4.3.4 بانڈ آرڈر (Bond Order)

شریک گرفت بند کے لیوئس کے بیان میں بانڈ آرڈر ایک سالمہ میں دو ایٹموں کے درمیان بند کی تعداد کی شکل میں دیا جاتا ہے۔ مثال کے طور پر H_2 (جس میں مشترک الیکٹران جوڑا ایک ہے)، O_2 میں (جس میں مشترک الیکٹران جوڑے دو ہیں) اور N_2 میں (جس میں مشترک الیکٹران جوڑے تین ہیں) بانڈ آرڈر بالترتیب 1، 2 اور 3 ہوگا۔ اسی طرح CO میں (C اور O کے درمیان مشترک الیکٹران کے تین جوڑے) میں بانڈ آرڈر 3 ہوگا۔ N_2 کے لیے بانڈ آرڈر 3 ہوگا اور اس کی $\Delta_a H^\ominus$، 946 $kJ\ mol^{-1}$ ہے جو ایک دو ایٹمی سالمہ کے لیے سب سے زیادہ ہوتی ہے۔

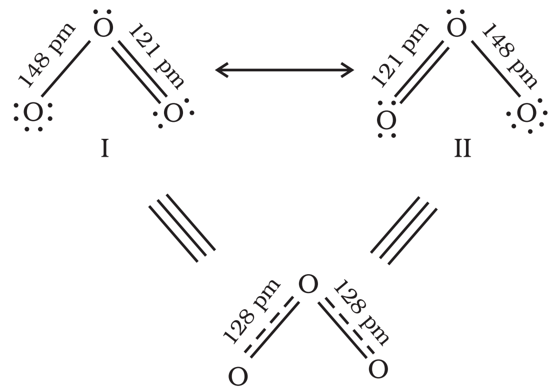
آئسو الیکٹرانی سالموں اور آین میں بانڈ آرڈر مماثل ہوتے ہیں۔ مثال کے طور پر F_2 اور O_2^{2-} کے بانڈ آرڈر 1 ہیں اور N_2، CO، NO^+ کے بانڈ آرڈر 3 ہوتے ہیں۔

"سالموں کے استحکام کو سمجھنے کے لیے ایک عام ربط یہ ہے کہ: بانڈ آرڈر بڑھنے کے ساتھ بندشی اینتھالپی بڑھتی ہے اور بندشی لمبائی گھٹتی ہے۔"

4.3.5 گمک ساختیں (Resonance Structures)

کبھی کبھی یہ دیکھا گیا ہے کہ واحد لیوئس ساخت کسی سالمے کے اظہار میں اس کے تجرباتی طور پر متعین کیے گئے پیرامیٹر سے مطابقت رکھنے میں ناکافی ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر، اوزون، O_3 سالمے کو ساخت I اور ساخت II دونوں طرح سے ظاہر کیا جاسکتا ہے۔

دونوں ساختوں میں ایک O – O اکہرا بند اور ایک O = O دوہرا بند ہے۔ عام طور پر O–O اور O=O بندشی لمبائیاں بالترتیب 148 pm اور 121 pm ہوتی ہیں۔ تجرباتی طور پر معلوم کی گئی O – O بندشی لمبائیاں O_3 میں برابر ہوتی ہیں (128 pm)۔ لہٰذا O_3 سالمے میں O–O بند اکہرے اور دوہرے بند کے درمیان ہوتے ہیں۔ ظاہر ہے کہ انہیں مندرجہ بالا دونوں لیوئس ساختوں میں سے کسی کے ذریعہ نہیں دکھایا جاسکتا۔



شکل 4.3 O_3 سالمے میں گمک
(ساخت I اور ساخت II مستند (Cononical) اشکال کا اظہار کرتی ہیں اور ساخت III اس کی گمک مخلوط ہے)

O_3 جیسے سالموں کی صحیح ساخت کے اظہار میں آنے والی دشواریوں سے نپٹنے کے لیے ہی گمک کا تصور پیش کیا گیا ہے **''گمک کے تصور کے مطابق جب کبھی بھی کوئی ایک لیوئس ساخت کسی سالمے کی ساخت کو صحیح طور پر ظاہر نہیں کر سکے گی تو بہت سی ساختیں جو توانائی، مرکزوں کے مقام، الیکٹرانوں کے بندشی اور غیر بندشی جوڑے میں یکساں ہوں گی تو انہیں مخلوط کی مستند ساختوں کے طور پر لیا جائے گا جو سالمے کی ساخت کو بالکل صحیح طور پر ظاہر کریں گی''۔** لہٰذا O_3 کے لیے مندرجہ بالا دو ساختیں مستند یا گمک ساختیں بناتی ہیں اور ان کا مخلوط یعنی III ساخت O_3 کی ساخت کو زیادہ صحیح طور پر ظاہر کرتی ہے۔ اس کو **'گمک مخلوط'** (Resonance Hybrid) بھی کہتے ہیں۔ گمک کو دوسروں والے تیر سے ظاہر کرتے ہیں۔

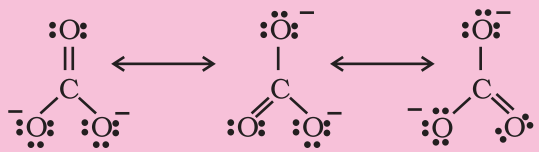
کاربونیٹ آین اور کاربن ڈائی آکسائڈ کے سالمے گمک ساختوں کی کچھ اور مثالیں ہیں۔

مسئلہ 4.3

گمک کی اصطلاح میں CO_3^{2-} آین کی وضاحت کیجیے۔

حل

کاربن اور آکسیجن کے درمیان دو اکہرے بند اور ایک دوہرے بند پر منحصر واحد لیوئس ساخت سالمے کو ظاہر کرنے کے لیے ناکافی ہے کیونکہ وہ غیر مساوی بندش کو ظاہر کرتا ہے۔ تجربات کی بنیاد پر نتائج کے مطابق CO_3^{2-} کے تمام بند مساوی ہیں۔ لہٰذا کاربونیٹ آین کو مستند اشکال I، II اور III کے گمک مخلوط کی شکل میں مندرجہ ذیل طریقے سے ظاہر کیا جاسکتا ہے۔



I II III

شکل 4.4 CO_3^{2-} میں گمک I، II اور III تین مستند اشکال دکھاتے ہیں۔

مسئلہ 4.4

CO_2 سالمے کی ساخت کی وضاحت کیجیے۔

حل

CO_2 میں کاربن اور آکسیجن کے درمیان بندشی لمبائی تجرباتی طور پر 115 pm معلوم کی گئی ہے۔ کاربن اور آکسیجن کے درمیان دوہرا بند (C = O) اور کاربن اور آکسیجن کے درمیان تہرے بند (C ≡ O) کی لمبائی عام طور پر بالترتیب 121 pm اور 110 pm ہوتی ہے۔ CO_2 میں کاربن اور آکسیجن کے درمیان بندشی لمبائی 115 pm، C = O اور C ≡ O کی قیمتوں کے درمیان ہے۔ ظاہر ہے کہ ایک واحد لیوئس ساخت اس صورت حال کو ظاہر نہیں کرسکتا اور یہ لازمی ہو جاتا ہے کہ ایک سے زیادہ لیوئس ساختیں لکھی جائیں اور یہ خیال کیا جائے کہ CO_2 کی ساخت، مستند یا گمک اشکال I، II اور III کے مخلوط کی شکل میں زیادہ صحیح طور پر دکھائی جاسکتی ہے۔



I II III

شکل 4.5 CO_2 سالمے میں گمک I، II اور III مستند اشکال دکھاتی ہیں

عمومی طور پر کہا جاسکتا ہے

- گمک سالمے کو مستحکم کر دیتا ہے کیونکہ گمک مخلوط کی توانائی کسی بھی ایک مستند ساخت سے کم ہوتی ہے؛ اور

• گمک بنڈش کی خصوصیات بحیثیت کل اوسط کر دیتا ہے۔
لہٰذا O_3 مخلوط گمک کی توانائی اس کی دو مستند اشکال I اور II (شکل 4.3) سے کم ہوتی ہے۔

گمک سے متعلق کچھ غلط فہمیاں ہیں جن کو دور کرنا لازمی ہے۔آپ کو یاد رکھنا چاہیے کہ:
- مستند اشکال کی کوئی حقیقت نہیں ہوتی۔
- کوئی سالمہ ایک لمحہ کے لیے ایک مستند شکل اور دوسرے لمحے میں دوسری مستند شکل میں نہیں پایا جاتا۔
- مستند اشکال کے درمیان ایسا کوئی توازن نہیں ہوتا جیسے کہ ٹوٹومیرزم میں ٹوٹومیرک (کیٹو اور اینول) شکلوں میں دیکھتے ہیں۔
- سالمے کی ایک ہی ساخت ہوتی ہے جو مستند اشکال کی گمک مخلوط ہوتی ہے اور جسے ایک لیوئس ساخت سے ظاہر نہیں کیا جاسکتا۔

4.3.6 بند کی قطبیت (Polarity of Bonds)

سو فیصد آینی یا شریک گرفت بنڈش کا وجود ایک مثالی صورت حال ہے۔ حقیقت میں کوئی بھی بنڈش پوری طرح سے آینی یا شریک بنڈش نہیں ہوتی۔ یہاں تک کہ ہائڈروجن کے دو ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بنڈش میں کچھ آینی خصوصیت بھی ہوتی ہے۔

جب دو یکساں ایٹموں مثال کے طور پر H_2، O_2، Cl_2، N_2 یا F_2 کے درمیان شریک گرفت بنڈش ہوتی ہے۔تو مشترک الیکٹرانوں کے جوڑے پر دونوں ایٹموں کے ذریعہ برابر کی کشش ہوتی ہے۔نتیجہ کے طور پر الیکٹران جوڑا مماثل مرکزوں کے عین درمیان ہوتا ہے۔اس طرح سے بننے والا بند غیر قطبی شریک گرفت بند کہلاتی ہے۔ اس کے برخلاف غیر متجانس مرکزی سالموں (Heteronuclear Molecule) جیسے HF میں دو ایٹموں کے درمیان مشترک الیکٹرانوں کا جوڑا فلورین کی سمت جھک جاتا ہے کیونکہ فلورین کی الیکٹران منفیت ہائڈروجن کے مقابلے میں بہت زیادہ ہوتی ہے (اکائی 3)۔حاصل شدہ شریک گرفت بند قطبی شریک گرفت بند ہے۔

قطبیت کی وجہ سے سالموں میں ڈائپول مومنٹ **(Dipole Moment)** ہوتا ہے (جیسا کہ ذیل میں ظاہر کیا گیا ہے) جس کی تعریف اس طرح بیان کی جاسکتی ہے کہ یہ مثبت اور منفی چارج کے مرکز کے درمیانی فاصلے اور چارج کی قدر کے حاصل ضرب کے برابر ہوتا ہے۔اس کو یونانی حرف 'μ' (میو) سے ظاہر کرتے ہیں۔ ریاضیاتی طور پر اسے مندرجہ ذیل طریقے سے ظاہر کرتے ہیں۔

چارج (Q) × علیحدگی کا فاصلہ (r) = (μ) ڈائپول مومنٹ

ڈائپول مومنٹ کو عام طور پر ڈِبائی اکائی (D) سے ظاہر کرتے ہیں۔
کنورژن فیکٹر مندرجہ ذیل ہے:

$$1\ D = 3.33564 \times 10^{-30}\ C\ m$$

جہاں C کولمب اور m میٹر ہے۔

مزید یہ کہ ڈائپول مومنٹ ایک ویکٹر ہے اور اسے ایک چھوٹے سے تیر کے ذریعہ ظاہر کرتے ہیں جس کی دُم منفی مرکز کی طرف اور سَر مثبت مرکز کی طرف ہوتا ہے۔لیکن کیمیا میں ڈائپول مومنٹ کی موجودگی کو صلیبی تیر (↦) کے ذریعے ظاہر کیا جاتا ہے جو سالمے کی لیوئس ساخت کے اوپر ہوتا ہے۔اس کا صلیب مثبت جانب جب کہ سر منفی جانب ہوتا ہے۔مثال کے طور پر HF کے ڈائپول مومنٹ کو اس طرح ظاہر کرتے ہیں:

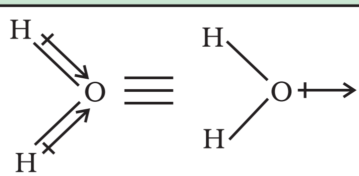
$$\overset{\longmapsto}{H - \ddot{F}:}$$

یہ تیر سالمے میں الیکٹران کی کثافت میں تبدیلی کی سمت کو ظاہر کرتا ہے۔ نوٹ کیجیے کہ صلیبی تیر کی سمت ڈائپول مومنٹ کی روایتی سمت کے مخالف ہے۔

کثیر ایٹمی سالموں میں ڈائپول مومنٹ نہ صرف بنڈشوں کے منفرد ڈائپول مومنٹ، جس کو بانڈ ڈائپول (Bond Dipole) بھی کہتے ہیں، پر منحصر ہوتا ہے بلکہ سالمے میں مختلف بنڈشوں کے مکانی تنظیم پر بھی منحصر ہوتا ہے۔ ایسی حالت میں سالمے کے ڈائپول مومنٹ مختلف بند کے ڈائپول مومنٹ کا ویکٹر حاصل جمع ہوتا ہے۔مثال کے طور پر H_2O کا سالمہ جس کی ساخت خمیدہ ہوتی ہے O–H کے دو بندوں کے درمیان 104.5° کا زاویہ ہوتا ہے۔ 6.17×10^{-30} C m کا کل ڈائپول ($1D = 3.33564 \times 10^{-30}$ Cm) دو OH بند کے ڈائپول مومنٹ کا حاصل ہوتا ہے۔



پیٹر ڈبائی، ڈچ کیمیاداں جسے 1936 میں ایکسرے ڈیفریکشن اور ڈائی پول مومنٹ میں اپنے کام پر نوبل انعام ملا تھا۔ ان کے اعزاز میں ڈائپول مومنٹ کی مقدار ڈبائی اکائی میں ظاہر کی جاتی ہے۔



(a) بند ڈائپول (b) حاصل بند ڈائپول

کل ڈائپول مومنٹ $\mu = 1.85\ D$

$1.85 \times 3.33564 \times 10^{-30}\ C\ m = 6.17 \times 10^{-30}\ C\ m$

BeF_2 میں ڈائپول مومنٹ صفر کے برابر ہوتا ہے۔ یہ اس وجہ سے کہ دو مساوی بند ڈائپول نقطے مخالف سمت میں ہوتے ہیں ایک دوسرے کے اثر کو ختم کر دیتے ہیں۔



BeF_2 میں ڈائپول مومنٹ

BeF_2 میں کُل ڈائپول مومنٹ

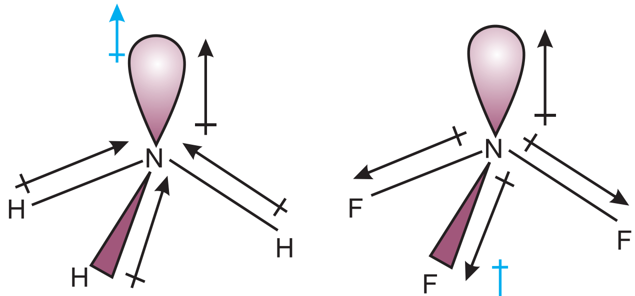
ٹیٹرا ایٹمی سالموں جیسے BF_3 میں، ڈائپول مومنٹ صفر ہوتا ہے حالانکہ B – F بند ایک دوسرے سے 120° پر ہوتے ہیں۔ تین بانڈ مومنٹ کا کل مجموعہ صفر ہوتا ہے کیونکہ کوئی بھی دو حاصل کا تیسرے کے مخالف اور مساوی ہوتا ہے۔



BF_3 سالمہ: (a) ڈائپول مومنٹ، (b) کل ڈائپول مومنٹ کو ظاہر کرتے ہوئے

آیئے ہم NH_3 اور NF_3 کے دلچسپ کیس کا مطالعہ کرتے ہیں۔ دونوں سالموں کی شکل پائیرامڈل ہے جس میں نائٹروجن ایٹم کے اوپر ایک الیکٹران کا تنہا جوڑا ہے۔ حالانکہ کلورین، نائٹروجن سے زیادہ الیکٹرونگیٹو ہے NH_3 کا حاصل ڈائپول مومنٹ $(4.90 \times 10^{-30}\ C\ m)$ NF_3 سے زیادہ ہے $(0.8 \times 10^{-30}\ C\ m)$۔ یہ اس وجہ سے ہے کہ NH_3 میں تنہا جوڑے کی وجہ سے اربٹل ڈائپول اسی سمت میں ہے جس سمت میں N – H بانڈ کا حاصل ڈائپول مومنٹ ہے، جبکہ NF_3 میں اربٹل ڈائپول $N – F_3$ بانڈ کے حاصل ڈائپول مومنٹ کی مخالف سمت میں ہے۔ تنہا جوڑے کی وجہ سے ڈائپول مومنٹ N – F کے حاصل مومنٹ کے اثر کو زائل کر دیتا ہے جس کی وجہ NF_3 کا ڈائپول مومنٹ کم ہوتا ہے۔ جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

کچھ سالموں کے ڈائپول مومنٹ جدول 4.5 میں دکھائے گئے ہیں۔



NF_3 میں حاصل ڈائپول مومنٹ $= 0.80 \times 10^{-30}\ C\ m$

NH_3 میں حاصل ڈائپول مومنٹ $= 4.90 \times 10^{-30}\ C\ m$

جیسا کہ تمام شریک گرفت بند میں جزوی آینی خصوصیت ہوتی ہے۔ آینی بند میں بھی جزوی شریک گرفت خصوصیت ہوتی ہے۔ آینی بند کی جزوی شریک گرفت خصوصیت کو فاجان نے مندرجہ ذیل اصول کی شکل میں بیان کیا ہے۔

- کیٹ آین کا سائز جتنا چھوٹا اور این آین کا سائز جتنا بڑا ہوگا آینی بند کا شریک گرفتی کردار اتنا ہی زیادہ ہوگا۔
- کیٹ آین پر جتنا زیادہ چارج ہوگا۔ آینی بند کی شریک گرفت خصوصیت اتنی ہی زیادہ ہوگی۔
- یکساں سائز اور چارج والے کیٹ آین میں جس کا الیکٹرانی تشکل عام عبوری دھات کی طرح $(n - 1)\ d^n\ ns^o$ ہوگا اس سے وہ زیادہ قطبی ہوگا جس کا الیکٹرانی تشکل نوبل گیس $ns^2\ np^6$، خاص قلوی اور قلوی ارضی دھاتوں کے دھاتی کیٹ آین کی طرح ہوگا۔

کیٹ آین الیکٹرانی چارج کو اپنی سمت کھینچ کر این آین کی تقطیب کرتا ہے اور اس طرح دونوں کے درمیان الیکٹرانی چارج بڑھ جاتا ہے۔ بالکل یہی شریک گرفت بند میں ہوتا ہے۔ یعنی نیوکلیس کے درمیان الیکٹرانی چارج کثافت بڑھ جاتی ہے۔ کیٹ آین کی تقطیب کی صلاحیت، این آین کی تقطیب کی صلاحیت اور این آین کے مسخ آین سازی ہونے کی حد وہ عوامل ہیں جو آینی بند کی فی صد شریک گرفت خصوصیت کا تعین کرتے ہیں۔

4.4 ویلنس شیل الیکٹران پیئر ریپلشن تھیوری (VSEPR)

جیسا کہ پہلے وضاحت کی جا چکی ہے، لیوئس کا نظریہ سالموں کی ساخت کی وضاحت کرنے میں ناکام رہا ہے۔ یہ نظریہ شریک گرفت سالموں کی شکل کی پیشین گوئی کا آسان طریقہ فراہم کرتا ہے۔ سِڈوک اور پاول نے

جدول 4.5 کچھ چنندہ سالمات کے ڈائپول مومنٹ

سالمے کی قسم	مثال	ڈائپول مومنٹ μ(D)	جیومیٹری
سالمہ (AB)			
	HF	1.78	خطّی (Linear)
	HCl	1.07	خطّی (Linear)
	HBr	0.79	خطّی (Linear)
	HI	0.38	خطّی (Linear)
	H_2	0	خطّی (Linear)
سالمہ (AB_2)			
	H_2O	1.85	خمیدہ (Bent)
	H_2S	0.95	خمیدہ (Bent)
	CO_2	0	خطّی (linear)
سالمہ (AB_3)			
	NH_3	1.47	ٹرائی گونل پائیرامڈل (Trigonal-pyramidal)
	NF_3	0.23	ٹرائی گونل پائیرامڈل (Trigonal-pyramidal)
	BF_3	0	ٹرائی گونل پلینر (Trigonal-planar)
سالمہ (AB_4)			
	CH_4	0	ٹیٹرا ہیڈرل (Tetrahedral)
	$CHCl_3$	1.04	ٹیٹرا ہیڈرل (Tetrahedral)
	CCl_4	0	ٹیٹرا ہیڈرل (Tetrahedral)

1940 میں ایٹم کے گرفتی خول میں الیکٹران جوڑوں کے درمیان دافع باہمی عمل کی بنیاد پر سادہ نظریہ پیش کیا۔ اس کو نیہوم اور گلسپی نے 1957 میں مزید آگے بڑھایا اور دوبارہ تعریف بیان کی۔

VSEPR نظریہ کے اہم مفروضات مندرجہ ذیل ہیں:

- سالمے کی شکل کا انحصار مرکزی ایٹم کے گرد گرفتی خول کے الیکٹران جوڑوں (بندشی یا غیر بندشی) کی تعداد پر ہوتا ہے۔
- گرفتی خول میں الیکٹران کے جوڑے ایک دوسرے کو دھکیلتے ہیں کیونکہ ان الیکٹران بادلوں پر منفی چارج ہوتا ہے۔
- الیکٹرانوں کے یہ جوڑے اسپیس میں ایسا مقام حاصل کرنے کی کوشش کرتے ہیں جہاں قوت دافعہ کم سے کم ہو لہٰذا ان کے درمیان فاصلہ زیادہ سے زیادہ ہوگا۔
- گرفتی خول کو ایک کرّہ (Sphere) کی طرح مانا جاتا ہے جہاں الیکٹران اس کی کرّوی سطح پر ہوتا ہے اور ایک دوسرے سے زیادہ سے زیادہ فاصلے پر رہتا ہے۔
- کثیر بند کو ایک واحد الیکٹران جوڑے کی طرح سمجھا جاتا ہے اور کثیر بند کے دو یا تین الیکٹران جوڑوں کو واحد عظیم جوڑا سمجھتے ہیں۔
- VSEPR ماڈل ان ساختوں میں استعمال ہوسکتا ہے جہاں دو یا دو سے زیادہ ممکن ساختیں ایک سالمے کو ظاہر کرتی ہیں۔

الیکٹران جوڑوں کا دافع باہمی عمل مندرجہ ذیل ترتیب میں گھٹتا ہے:

تنہا جوڑا (lp) – تنہا جوڑا (lp) > تنہا جوڑا (lp) – بندشی جوڑا (bp) > بندشی جوڑا – بندشی جوڑا (bp)

(lp – lp > lp – bp > bp – bp)

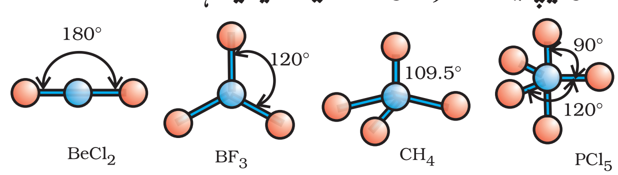
نیوہوم اور گلیسپی (1957) نے VSEPR ماڈل کو الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے اور بندشی جوڑے کے درمیان اہم فرق کو سمجھا کر بہتر بنانے کی کوشش کی۔ الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا مرکزی ایٹم پر ہی قائم رہتا ہے جبکہ ہر گرفتی جوڑا دو ایٹموں کے درمیان مشترک ہوتا ہے۔ نتیجہ کے طور پر سالمے میں تنہا الیکٹرانوں کا جوڑا الیکٹرانوں کے گرفتی جوڑے کے مقابلے میں زیادہ جگہ گھیرتا ہے۔ اسی لیے لون پیئر - لون پیئر میں ہٹاؤ زیادہ ہوتا ہے بہ نسبت لون پیرء - بانڈ پیئر اور بانڈ پیئر - بانڈ پیئر کے اسی ہٹاؤ کی وجہ سے سالموں کے بندشی زاویوں میں تبدیلی اور ان کی مثالی شکلوں میں فرق پائے جاتے ہیں۔

''VSEPR نظریے کے مطابق سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی پیشین گوئی کے لیے سالموں کو دو جماعتوں میں تقسیم کرنا آسان ہوتا ہے جیسے (i) ایسے سالمے جن کے مرکزی ایٹم پر الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا نہ ہو اور (ii) ایسے سالمے جن کے مرکزی ایٹم پر ایک یا ایک سے زیادہ الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے ہوں۔''

جدول 4.6 میں AB قسم کے کچھ سالموں/آینوں کی جیومیٹری اور مرکزی ایٹم A پر (بغیر تنہا الیکٹران کے جوڑے کے) الیکٹران کے جوڑوں کی ترتیب کو دکھایا گیا ہے۔ جدول 4.7 میں کچھ سادہ سالموں اور آینوں کی اشکال کو دکھایا گیا ہے جن میں مرکزی ایٹم پر ایک یا دو لون پیئر ہیں۔

جدول 4.8 ان وجوہات کی وضاحت کرتی ہے جو سالموں کی جیومیٹری مسخ ہونے کے لیے ذمہ دار ہیں۔

جیسا کہ جدول 4.6 میں دکھایا گیا ہے، AB_2، AB_3، AB_4، AB_5 اور AB_6 مرکبات میں مرکزی ایٹم A کے گرد الیکٹران جوڑوں اور B ایٹموں کی ترتیب خطی (Linear)، ٹرائی گونل پلینر ٹیٹراہیڈرل، ٹرائی گونل بائی پرامڈل اور آکٹاہیڈرل ہے۔ اس طرح کی ترتیب BF_3 (AB_3) PCl_4 (AB_4) اور PCl_5 (AB_5) جیسے سالموں میں دیکھنے کو ملتی ہے اور انہیں نیچے گیند اور چھڑ ماڈل کے ذریعہ دکھایا گیا ہے۔



شکل 4.6 ان سالمات کی شکل جن کے مرکزی ایٹم پر تنہا جوڑا نہیں ہے

VSEPR نظریہ سالموں کی ایک بڑی تعداد خاص طور پر پی-بلاک کے عناصر کی جیومیٹری کی پیشین گوئی کر سکتا ہے۔ یہ اس وقت بھی سالمے کی جیومیٹری کو بہت حد تک بالکل صحیح صحیح بتانے میں کامیاب ہوتا ہے جب ممکنہ اشکال کے درمیان توانائی کے فرق بہت کم ہوں۔ VSEPR نظریہ کی سالموں کی اشکال پر الیکٹران جوڑوں کے دفاعی عمل سے متعلق اثرات کی نظریاتی بنیاد بہت زیادہ مضبوط نہیں ہے اور یہ شبہات اور بحث کا موزوں بنا ہوا ہے۔

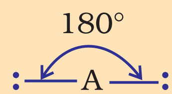
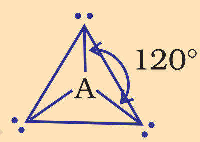
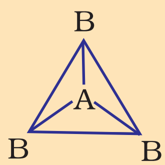
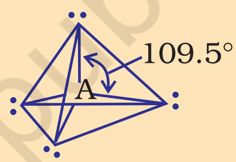
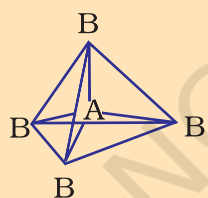
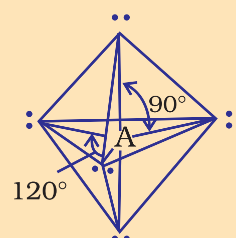
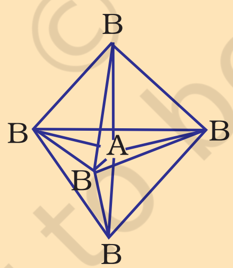
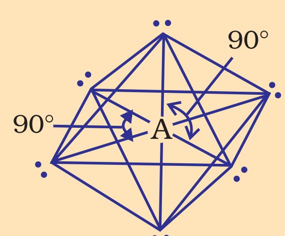
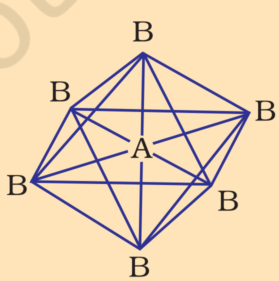
4.5 گرفت بند نظریہ (Valence Bond Theory)

ہم جانتے ہیں کہ لیوس کا نظریہ سالموں کی ساخت لکھنے میں ہماری مدد کرتا ہے لیکن یہ کیمیائی بند کے بننے کی وجوہات کی وضاحت کرنے میں ناکام ہے۔ یہ H_2 اور F_2 جیسے سالموں میں بند افتراق اینتھالپی اور بندشی لمبائی (H_2 کے لیے $435.8\ kJ\ mol^{-1}$، 74 pm اور F_2 کے لیے $150.6\ kJ\ mol^{-1}$، 42 pm) کے فرق کی وجوہات کی بھی وضاحت نہیں کرتا حالانکہ دونوں میں اپنے اپنے ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران جوڑے کے اشتراک سے تنہا شریک بندش بند بنتا ہے۔ یہ کثیر ایٹمی سالموں کی شکل کے بارے میں بھی کوئی تصور پیش نہیں کرتا۔

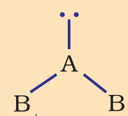
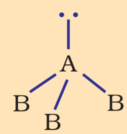
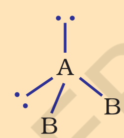
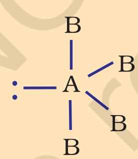
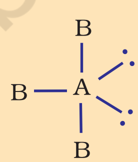
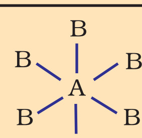
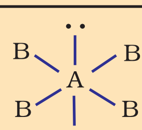
اسی طرح VSEPR کا نظریہ سادہ سالموں کی جیومیٹری بتاتا ہے لیکن نظریاتی طور پر یہ ان کی وضاحت نہیں کرتا اور اس کے محدود استعمال ہیں۔ ان حدود کو پار کرنے کے لیے کوانٹم میکانیکی اصولوں کی بنیاد پر دو اہم نظریات پیش کیے گئے ہیں۔ یہ ویلنس بانڈ نظریہ اور مولیکیولر آربٹل نظریات ہیں۔

ویلنس بانڈ تھیوری ہیٹلر اور لنڈن نے 1927 میں پیش کی اور پالنگ اور دیگر سائنسدانوں نے اسے مزید آگے بڑھایا۔ ویلنس بانڈ تھیوری پر بحث عناصر کے الیکٹرانی تشکل (اکائی 2)، ایٹمی اربٹل کا اوورلیپنگ کرائیٹیر یا ایٹمی اربٹل کی ہائبرڈائزیشن تغیر اور انطباق کے اصولوں کے علم پر مبنی ہے۔ ان پہلوؤں کے مطابق ویلنس بانڈ تھیوری پر تفصیلی بحث اس کتاب کے احاطہ سے باہر ہے۔ لہٰذا آسانی کے لیے ویلنس بانڈ تھیوری پر بحث کیفیتی اور غیر ریاضیاتی طرزِ عمل کی اصطلاح میں ہی کی گئی ہے۔ ابتدا میں آیئے ہائڈروجن سالمے کے بننے کے عمل کو دیکھتے ہیں جو تمام سالموں میں سب سے سادہ ہے۔

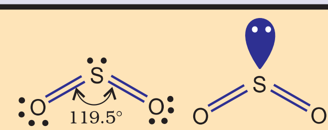
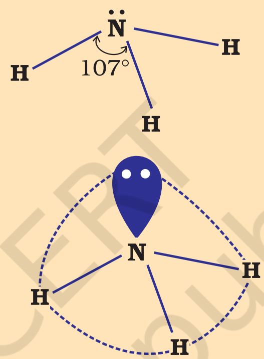
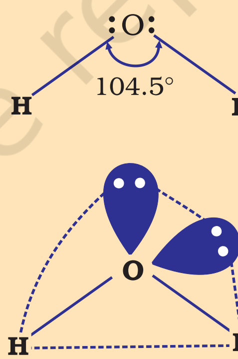
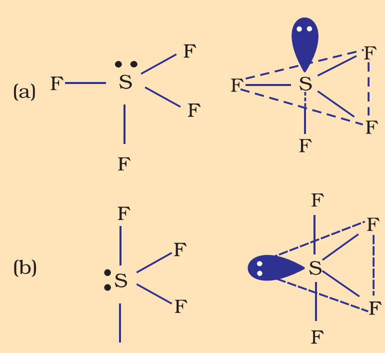
جدول 4.6 ان سالموں کی جیومیٹری جن کے مرکزی ایٹم پر لون پیئر الیکٹران نہیں ہوتے

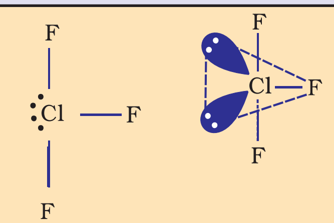
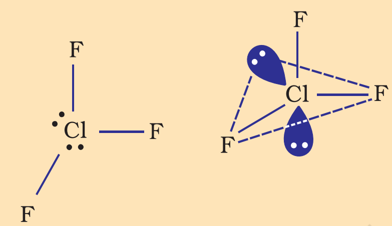
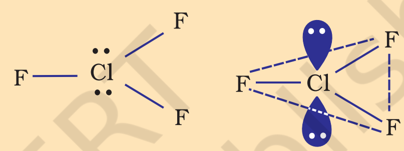
الیکٹران جوڑوں کی تعداد	الیکٹران جوڑوں کی ترتیب	سالمے کی جیومیٹری	مثالیں
2	 خطّی	B—A—B خطّی	$BeCl_2$, $HgCl_2$
3	 ٹرائی گونل پلینر	 ٹرائی گونل پلینر	BF_3
4	 ٹیٹراہیڈرل	 ٹیٹراہیڈرل	CH_4, NH_4^+
5	 ٹرائی گونل بائی پیرامڈل	 ٹرائی گونل بائی پیرامڈل	PCl_5
6	 آکٹاہیڈرل	 آکٹاہیڈرل	SF_6

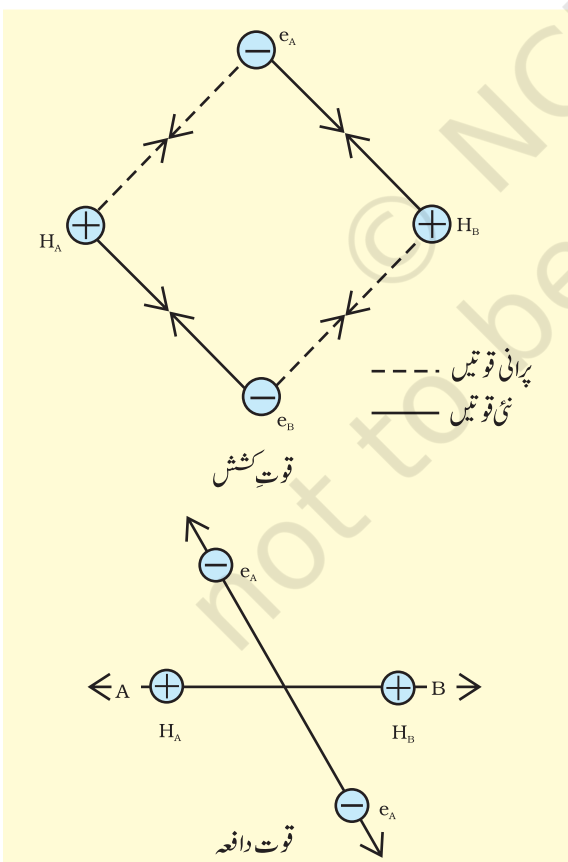
جدول 4.7 کچھ سادہ سالموں/آینوں کی شکل (جیومیٹری) جن کے مرکزی ایٹم پر ایک یا ایک سے زیادہ تنہا الیکٹرانوں کا جوڑا ہے۔

سالموں کی قسم	بندشی جوڑوں کی تعداد	تنہا جوڑوں کی تعداد	الیکٹران جوڑوں کی ترتیب	جیومیٹری	مثال
AB_2E	2	1	 ٹرائی گونل سطحی	خمیدہ	SO_2, O_3
AB_3E	3	1	 ٹیٹرا ہیڈرل	ٹرائی گونل پیرامڈل	NH_3
AB_2E_2	2	2	 سہ گوشی دوہری	خمیدہ	H_2O
AB_4E	4	1	 سہ گوشی ہرمی	سی سا	SF_4
AB_3E_2	3	2	 ٹرائی گونل بائی پیرامڈل	T-شکل	ClF_3
AB_5E	5	1	 آکٹاہیڈرل	مربع پیرامڈ	BrF_5
AB_4E_2	4	2	 آکٹاہیڈرل	مربع سطحی	XeF_4

جدول 4.8 بونڈ پیئر اور لون پیئر رکھنے والے سالموں کی اشکال

سالمے کی قسم	بندشی جوڑوں کی تعداد	تنہا جوڑوں کی تعداد	الیکٹرانوں کی ترتیب	شکل	حاصل شدہ شکل کی وجوہات
AB_2E	4	1		خمیدہ	نظریاتی طور پر اس کی شکل ٹرائی انگیولر سطحی ہونی چاہیے لیکن اس کی شکل خمیدہ ہے۔ اس کی وجہ یہ ہے کہ اس میں لون پیئر - بونڈ پیئر قوت دافعہ زیادہ ہے بہ نسبت بونڈ پیئر - بونڈ پیئر قوت دافعہ کے۔ لہٰذا زاویہ 120° سے گھٹ کر 119.5° رہ گیا۔
AB_3E	3	1		ٹرائی گونل بائی پیرامڈل	اگر یہاں lp کی جگہ bp ہوتا تو اس کی شکل ٹیٹراہیڈرل ہوتی لیکن ایک تنہا جوڑا موجود ہے لہٰذا lp – bp قوت دافعہ (جو bp – bp قوت دافعہ سے زیادہ ہے) کی وجہ سے گرفتی جوڑوں کے درمیان زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 107° ہو گیا ہے۔
AB_2E_2	2	2		خمیدہ	یہ شکل ٹیٹراہیڈرل ہوتی اگر یہاں چاروں بونڈ پیئر (bp) ہوتے لیکن دو لون پیئر (lp) موجود ہیں جس کی وجہ سے شکل مسخ شدہ ٹیٹراہیڈرل یا خمیدہ ہے۔ اس کی وجہ یہ ہے کہ lp – lp قوت دافعہ lp – bp قوت دافعہ سے زیادہ ہے جو bp – bp سے زیادہ ہے لہٰذا زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 104.5° رہ گیا۔
AB_4E	4	1	 زیادہ متحکم	سی-سا	(a) میں lp محوری مقام پر موجود ہے لہٰذا 90° پر تین bp – lp قوت دافعہ ہیں۔ (b) میں lp خطِ استوائی مقام پر ہے اور دو bp – lp قوت دافعہ ہیں لہٰذا (b) کی تنظیم زیادہ متحکم ہے۔ (b) میں ظاہر کی گئی شکل مسخ شدہ ٹیٹراہیڈرن، تہہ دار مربع یا سی سا کہلاتی ہے۔

سالمے کی قسم	بندشی جوڑوں کی تعداد	تنہا جوڑوں کی تعداد	الیکٹرانوں کی ترتیب	شکل	حاصل شدہ شکل کی وجوہات
AB_3E_2	3	2	(a)  (b)  (c) 	T- شکل	(a) میں lp استوائی مقام پر ہیں لہٰذا lp-bp قوت دافعہ کم ہوگی بہ نسبت دوسروں کے جن میں lp محوری مقام پر ہیں لہٰذا (a) کی شکل زیادہ مستحکم ہوگی۔ (T- شکل)



شکل 4.7 H_2 سالمے کی تشکیل کے دوران کشش اور دافع قوتیں

مان لیجیے ہائڈروجن کے دو ایٹم A اور B جن کے مرکز N_A اور N_B ہیں، ایک دوسرے کی سمت آ رہے ہیں۔ ان میں موجود الیکٹرانوں کو C_A اور C_B سے دکھایا گیا ہے۔ جب یہ دونوں ایٹم ایک دوسرے سے زیادہ فاصلے پر ہیں تو ان کے درمیان کوئی کشش نہیں ہوتی۔ جیسے جیسے یہ ایک دوسرے کے نزدیک آتے ہیں، نئی قوتِ کشش اور دافع قوتِ عمل پیرا ہیں۔

قوت کشش پیدا ہوتی ہے:

(i) ایک ایٹم کے مرکز اور اس کے ہی الیکٹران کے درمیان یعنی $N_A - e_A$ اور $N_B - e_B$۔

(ii) ایک ایٹم کے نیوکلیس اور دوسرے ایٹم کے الیکٹران کے درمیان یعنی $N_A - e_B$ ، $N_A - e_B$

اسی طرح دافع قوتِ پیدا ہوگی:

(i) دونوں ایٹموں کے الیکٹرانوں کے درمیان یعنی $e_A - e_B$۔

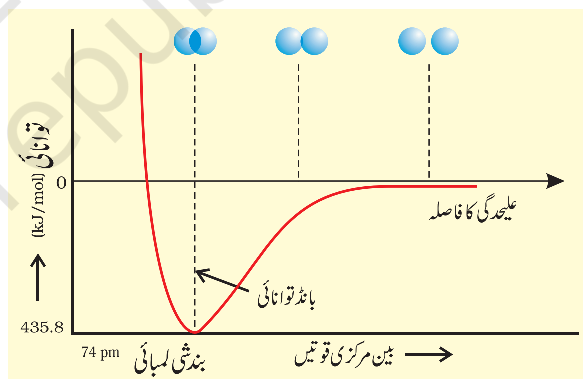
(ii) دونوں ایٹموں کے نیوکلیس کے درمیان یعنی $N_A - N_B$۔

قوت کشش دونوں ایٹموں کو ایک دوسرے کے نزدیک لانے کی کوشش کرے گی جبکہ قوتِ دافعہ انہیں ایک دوسرے سے الگ کرنے کی کوشش کرے گی (شکل 4.7)۔

تجرباتی طور پر یہ پایا گیا ہے کہ نئی قوتِ کشش کی قدر نئی دافع قوتِ سے زیادہ ہوتی ہے۔ نتیجہ کے طور پر دونوں ایٹم ایک دوسرے کے نزدیک آتے ہیں اور ان کی مضمر توانائی (Potential Energy) کم ہو جاتی ہے۔ یہاں تک کہ ایک مقام وہ آتا ہے جہاں کل قوتِ کشش اور دافع قوت میں توازن پیدا ہو جاتا ہے اور نظام کمترین توانائی حاصل کرتا ہے۔ اس مقام پر دونوں ہائڈروجن ایٹم بندھ جاتے ہیں اور ایک مستحکم سالمہ بناتے ہیں جس کی بندشی لمبائی 74 pm ہوتی ہے۔

چونکہ توانائی کا اخراج ہوتا ہے جب ہائڈروجن کے دو ایٹموں کے درمیان بند بنتا ہے، لہٰذا ہائڈروجن کا سالمہ تنہا ہائڈروجن ایٹموں کے مقابلے میں زیادہ مستحکم ہوتا ہے۔ اس میں جو توانائی خارج ہوتی ہے وہ **بانڈ اینتھالپی** کہلاتی ہے جو شکل 4.8 میں دکھائے گئے منحنی کی سب سے نچلی سطح کے مطابق ہے۔ اس کے برعکس ایک مول ہائڈروجن کے سالموں کو جُدا کرنے میں $435.8\ kJ\ mol^{-1}$ توانائی کی ضرورت ہوتی ہے۔

$$H_2(g) + 435.8\ kJ\ mol^{-1} \rightarrow H(g) + H(g)$$



شکل 4.8 H_2 سالمہ کی تشکیل کا مضمر توانائی منحنی H_2 ایٹموں کے بین مرکزی فاصلوں کے فنکشن کی حیثیت سے۔ خم کا کمترین حصّہ H_2 سالمہ کی سب سے زیادہ مستحکم حالت کو ظاہر کرتا ہے۔

4.5.1 اربٹل اوورلیپ کا تصور
(Orbital Overlap Concept)

ہائڈروجن سالمے کی تشکیل میں کمترین توانائی کا ایک ایسا مقام ہوتا ہے جہاں ہائڈروجن کے دو ایٹم اتنے نزدیک ہوتے ہیں کہ ان کے ایٹمی اربٹل کے مابین جُزوی دخل اندازی ہوتی ہے۔ ایٹمی اربٹل کی یہ جُزوی دخل اندازی ایٹمی اربٹل کی اوورلیپنگ کہلاتی ہے جس کے نتیجہ میں الیکٹرانوں کے جوڑے بنتے ہیں۔ اوورلیپ کی مقدار شریک گرفت بند کی توانائی کو طے کرتی ہے۔ عام طور پر جتنی اوورلیپنگ ہوگی دو ایٹموں کے درمیان بننے والا بند اتنا ہی مضبوط ہوگا۔ لہٰذا اربٹل اوورلیپ کے تصور کے مطابق دو ایٹموں کے درمیان شریک گرفت بند کی تشکیل بندش خول میں موجود متضاد اسپن والے الیکٹرانوں کے جوڑے بننے کے نتیجے میں ہوتی ہے۔

4.5.2 بندشوں کی سمتی خصوصیات
(Directional Properties of Bonds)

جیسا کہ ہم دیکھ چکے ہیں کہ شریک گرفت بند کی تشکیل ایٹموں کے اربٹل کی اوورلیپنگ کے نتیجے میں ہوتی ہے۔ ہائڈروجن کا سالمہ دو H ایٹموں کے 1s اربٹل کی اوورلیپنگ کی وجہ سے ہوتا ہے۔

کثیر ایٹمی سالموں جیسے CH_4، NH_3 اور H_2O میں بند کی تشکیل کے علاوہ ان کی جیومیٹری بھی اہم ہوتی ہے۔ مثال کے طور پر ایسا کیوں ہے کہ CH_4 سالمہ کی شکل ٹیٹراہیڈرل اور بندشی زاویہ HCH، 109.5° ہے؟ NH_3 سالمہ کی شکل پیرامڈل کیوں ہوتی ہے؟

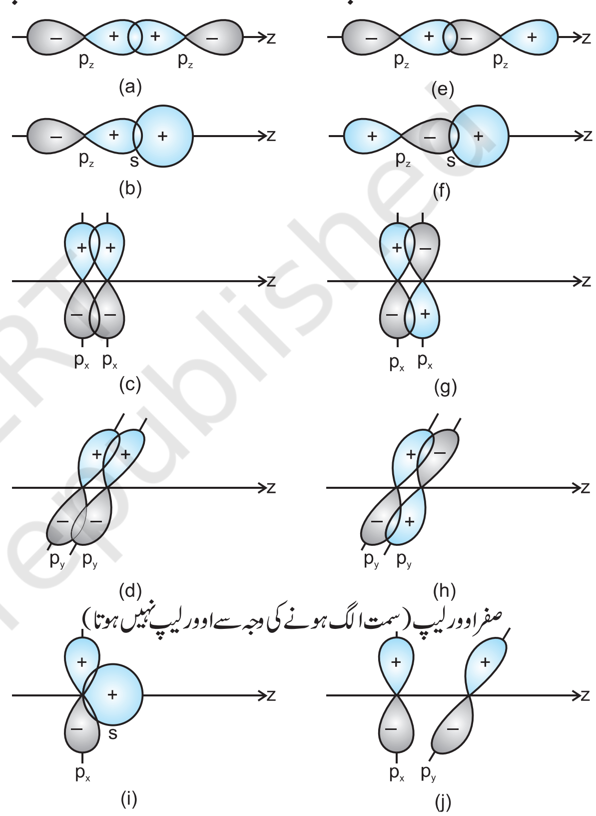
ویلنس بانڈ تھیوری CH_4، NH_3 اور H_2O جیسے کثیر ایٹمی سالموں میں بند کی شکل، ان کے بننے کے عمل اور سمتی خصوصیات کی وضاحت ایٹمی اربٹل کی اوورلیپنگ اور ہائبریڈائزیشن کی اصطلاح میں کرتی ہے۔

4.5.3 ایٹمی اربٹل کی اوورلیپنگ
(Overlapping of Atomic Orbitals)

جب اربٹل کے دو ایٹم بند تشکیل دینے کے لیے قریب آتے ہیں تو ان کا یہ اوورلیپ مثبت، منفی یا صفر ہو سکتا ہے اس کا انحصار نشان (ہیئت) اور جگہ میں مداری لہر کے فنکشن کی وسعت اور اس کی تشریق کی سمت پر ہوتا ہے (شکل 4.9) سرحدی سطح ڈائیگرام میں دیے گئے مثبت اور منفی نشانات مداری لہر کا نشان (ہیئت) ظاہر ہوتے ہیں۔ ان کا چارج سے تعلق نہیں ہوتا ہے۔ بند بنانے کے لیے اربٹل کے نشان (ہیئت) اور سمت یکساں ہونے چاہئیں۔ اسے مثبت اوورلیپ کہتے ہیں۔ s اور p اربٹل کے متعدد اوورلیپوں کو شکل 4.9 میں ظاہر کیا گیا ہے۔

شریک گرفت بندش کی تشکیل کے خاص عوامل کے طور پر اوورلیپ کے معیار کا اطلاق ہومونیوکلیر/ ہیٹرونیوکلیر دو ایٹمی سالموں اور کثیر ایٹمی سالموں پر

یکساں طور سے ہوتا ہے۔ ہم جانتے ہیں کہ CH_4، NH_3 اور H_2O سالموں کی اشکال بالترتیب ٹیٹرا ہیڈرل، پیرامڈل اور خمیدہ ہوتی ہیں۔ یہ ایک دلچسپ بات ہوگی اگر ہم VB تھیوری کا استعمال کرتے ہوئے یہ معلوم کریں کہ کیا ان جیومیٹریکل اشکال کو اربٹل اوورلیپ کی اصطلاح میں واضح کیا جاسکتا ہے؟



شکل **4.9** s، p اربٹل کی مثبت، منفی اور صفر اوورلیپ

آیئے ہم پہلے CH_4 (میتھین) سالمہ کو لیتے ہیں گراؤنڈ اسٹیٹ پر کاربن کا الیکٹرانی تشکل [He] $2s^2\ 2p^2$ ہے جو کہ مشتعل حالت (Excited State) میں [He] $2s^1\ 2p_x^1\ 2p_y^1\ 2p_z^1$ ہوجاتی ہے۔ مشتعل ہونے کے لیے دستیاب توانائی، کاربن اور ہائڈروجن کے اربٹل کے درمیان اوورلیپ کے دوران خارج ہونے والی توانائی سے فراہم ہوتی ہے۔ کاربن کے چار اربٹل جن میں سے ہر ایک میں ایک تنہا بغیر جوڑے کا الیکٹران ہوتا ہے چار ہائڈروجن کے 1s اربٹل جن میں خود بھی ایک ہی الیکٹران ہوتا ہے، سے اوورلیپ کر سکتے ہیں۔ نتیجہ کے طور پر چار C-H بند بنتے ہیں۔ تاہم یہ دیکھا جائے گا کہ جبکہ کاربن کے تین p اربٹل ایک دوسرے سے 90° پر ہوتے ہیں ان کے لیے HCH زاویہ بھی 90° ہوگا۔ اس طرح تین C-H بند ایک دوسرے سے 90° پر ہوں گے۔ کاربن کا 2s اربٹل اور ہائڈروجن کا 1s اربٹل کرّوی متشاکل ہوتے ہیں اور کسی سمت بھی اوورلیپ کر سکتے ہیں۔ لہٰذا چوتھے C-H بند کی سمت واضح نہیں کی جاسکتی۔ یہ بیان HCH ٹیٹرا ہیڈرل زاویہ 109.5° سے مطابقت نہیں رکھتا۔ صاف ظاہر ہے کہ صرف ایٹمی اربٹل کی اوورلیپ CH_4 سالمے کے بند کی سمتی خصوصیات کے لیے ذمہ دار نہیں ہوسکتی۔ اسی طریقہ اور بحث کا استعمال کرتے ہوئے دیکھا جاسکتا ہے کہ NH_3 اور H_2O سالموں میں HNH اور HOH بندشی زاویہ 90° کا ہونا چاہیے۔ یہ بیان NH_3 اور H_2O سالموں میں حقیقی بندشی زاویوں 107° اور 104.5° سے مطابقت نہیں رکھتا۔

4.5.4 اوورلیپنگ کی قسمیں اور شریک گرفت بند کی فطرت (Types of Overlapping and Nature of Covalent Bonds)

اوورلیپنگ کی بنیاد پر شریک گرفت بند دو زمروں میں تقسیم کیے جاسکتے ہیں۔

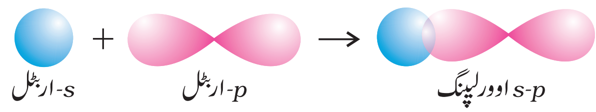
(i) سِگما (σ) بند اور (ii) پائی (π) بند

(i) سگما (σ) بند: اس قسم کا شریک گرفت بند بندشی اربٹل کے سروں سے سروں کی اوورلیپنگ کے نتیجہ میں بنتے ہیں جو بین مرکزی محور کے ساتھ ہوتے ہیں۔ اس کو ہیڈ آن (Head On) یا محوری اوورلیپ بھی کہتے ہیں۔ یہ ایٹمی اربٹل کے مندرجہ ذیل کسی بھی ایک اتحادی عمل سے بن سکتے ہیں۔

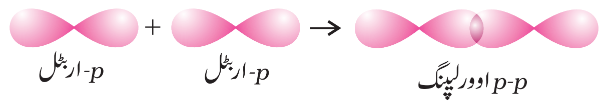
- **s-s اوورلیپنگ:** اس حالت میں دو آدھے بھرے ہوئے s-اربٹل کی بین مرکزی محور کے ساتھ اوورلیپنگ ہوتی ہے جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔



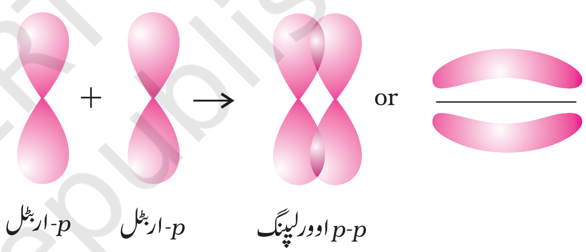
- **s-p اوورلیپنگ:** اس طرح کی اوورلیپنگ ایک ایٹم کے نصف بھرے ہوئے s- اربٹل اور دوسرے ایٹم کے نصف بھرے ہوئے p اربٹل کے درمیان ہوتی ہے۔



- **p-p اوورلیپنگ:** اس طرح کی اوورلیپنگ نزدیک آنے والے دو ایٹموں کے نصف بھرے ہوئے p-اربٹل کے درمیان ہوتی ہے۔



(ii) پائی (π) بند: π بند بنانے میں ایٹمی اربٹل کی اوورلیپنگ اس طرح ہوتی ہے کہ ان کے محور ایک دوسرے کے متوازی اور بین مرکزی محور کے عمودی ہوتے ہیں اس طرح جانبی اوورلیپنگ سے بننے والے اربٹل حصہ لینے والے ایٹموں کی سطح کے اوپر اور نیچے تشتری کی شکل کے دو الیکٹران بادلوں پر مشتمل ہوتے ہیں۔



4.5.5 سگما اور پائی بند کی قوت (Strength of Sigma and pi Bonds)

بنیادی طور پر کسی بند کی طاقت اس کی اوورلیپنگ کی حد پر منحصر ہوتی ہے۔ سگما (σ) بند میں اربٹل کی اوورلیپنگ بہت زیادہ ہوتی ہے۔لہٰذا یہ پائی (π) بانڈ سے زیادہ طاقتور ہوتے ہیں جہاں اوورلیپنگ کی حد کم ہوتی ہے۔مزید یہ کہ π بند دو ایٹموں کے درمیان سگما بند کے علاوہ ہوتا ہے۔ یہ ان سالموں میں ہمیشہ موجود ہوتا ہے جہاں کثیر بند (دوہرے یا تہرے) پائے جاتے ہیں۔

4.6 مخلوطیت (Hybridisation)

CH_4، NH_3 اور H_2O جیسے کثیر ایٹمی سالموں کی جیومیٹریائی شکل کی خصوصیات کی وضاحت کرنے کے لیے پالنگ نے مخلوطیت کا تصور پیش کیا ہے۔اس کے مطابق ایٹمی اربٹل آپس میں مل کر نئے قسم کے یکساں اربٹل بناتے ہیں جو مخلوط اربٹل کہلاتے ہیں۔خالص اربٹل کے برعکس **مخلوط اربٹل** بند بنانے میں استعمال ہوتے ہیں اس عمل کو **مخلوطیت (Hybridisation)** کہتے ہیں جس کو اس طرح بیان کیا جاسکتا ہے کہ یہ توانائی میں ہلکے سے فرق والے اربٹل کی ملاوٹ کا عمل ہے تاکہ ان کی توانائی کو دوبارہ تقسیم کیا جاسکے اور وہ یکساں توانائی اور یکساں شکل والے اربٹل کے نئے گروپ کی شکل میں حاصل ہوسکیں۔مثال کے طور پر جب کاربن کے ایک $2s^2$ اور تین $2p^2$ اربٹل کا اخلاط ہوتا ہے تو چار نئے مخلوط اربٹل sp^3 حاصل ہوتے ہیں۔

مخلوطیت کی نمایاں خصوصیات : مخلوطیت کی اہم خصوصیات مندرجہ ذیل ہیں:

1۔ مخلوط اربٹل کی تعداد ان ایٹمی اربٹل کے برابر ہوتی ہے جن میں مخلوطیت ہوتی ہے۔

2۔ مخلوط اربٹل توانائی اور شکل کے اعتبار سے ہمیشہ یکساں ہوتے ہیں۔

3۔ مستحکم بند بنانے میں خالص ایٹمی اربٹل کے مقابلے میں مخلوط اربٹل زیادہ اثر دار ہوتے ہیں۔

4۔ یہ مخلوط اربٹل اسپیس میں ایسی سمت کی طرف رخ کرتے ہیں جہاں الیکٹران جوڑوں کے درمیان قوت دافعہ کمترین ہو اور اس طرح ان کی ترتیب مستحکم ہوتی ہے۔ لہٰذا مخلوطیت کی قسم کے سالمے کی جیومیٹری کو ظاہر کرتی ہے۔

مخلوطیت کے لیے اہم شرائط

(i) ایٹم کے گرفت خول میں موجود اربٹل ہی اخلاط کرتے ہیں۔

(ii) جن اربٹل میں مخلوطیت ہورہی ہے ان کی توانائی تقریباً برابر ہونی چاہیے۔

(iii) یہ ضروری نہیں ہے کہ مخلوطیت میں صرف نصف بھرے ہوئے اربٹل ہی حصّہ لیں گے۔ کچھ جگہوں پر گرفتی خول کے بھرے ہوئے اربٹل بھی مخلوطیت میں حصّہ لیتے ہیں۔

4.6.1 مخلوطیت کی قسمیں (Types of Hybridisation)

مخلوطیت کی بہت سی قسمیں ہوتی ہیں جن میں s، p اور d اربٹل شامل ہوتے ہیں۔مخلوطیت کی مختلف اقسام مندرجہ ذیل ہیں۔

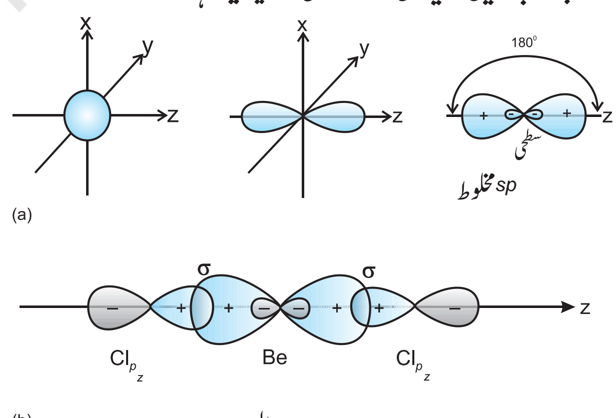
(I) sp-مخلوطیت : مخلوطیت کی اس قسم میں ایک s اور ایک p اربٹل کی آمیزش شامل ہوتی ہے جس کے نتیجے میں دو یکساں مخلوط sp اربٹل

حاصل ہوتے ہیں۔ sp مخلوطیت کے لیے مناسب اربٹل s اور pz ہوتے ہیں، اگر مخلوط اربٹل کو z- محور پر ہونا ہے۔ ہر ایک sp مخلوط اربٹل میں s 50% اور 50% p کردار ہوتا ہے۔ ایسے سالمے جن کے مرکزی ایٹم میں s-p مخلوطیت ہے اور وہ براہِ راست دوسرے مرکزی ایٹموں سے جُڑے ہوئے ہوں تو ان کی جیومیٹری خطّی ہوتی ہے۔ اس طرح کی مخلوطیت وتری مخلوطیت (Diagonal Hybridisation) بھی کہلاتی ہے۔

دو sp مخلوط z- محور پر مخالف سمت میں ہوتے ہیں جن کے مثبت لوب اُبھرے ہوئے ہوتے ہیں اور منفی لوب بہت چھوٹے اور دبے ہوئے ہوتے ہیں جس کی وجہ سے اوورلیپنگ مؤثر ہوتی ہے جس کے نتیجے میں مضبوط بند بنتے ہیں۔

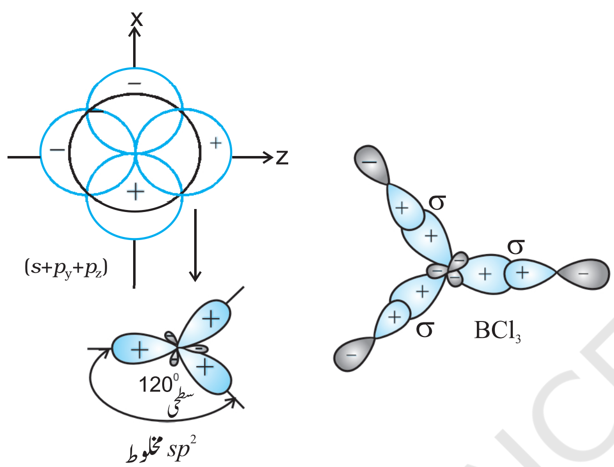
sp- مخلوطیت والے سالمات کی مثالیں

$BeCl_2$: Be کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں الیکٹرانی تشکل $1s^2\ 2s^2$ ہوتا ہے۔ مشتعل حالت میں ایک 2s الیکٹران خالی 2p اربٹل میں چلا جاتا ہے جس کی وجہ سے بندش دو ہوتی ہے ایک 2s اور ایک 2p اربٹل مخلوط ہوجاتے ہیں اور دو sp مخلوط اربٹل بناتے ہیں یہ دو مخلوط اربٹل مخالف سمت میں ہوتے ہیں اور 180° کا زاویہ بناتے ہیں۔ ہر ایک sp مخلوط اربٹل کلورین کے 2p اربٹل سے محوری اوورلیپ کرتا ہے اور دو $BaCl$ سگما بانڈ بنتے ہیں۔ یہ شکل 4.10 میں دکھایا گیا ہے۔



شکل 4.10 (a) s اور p اربٹل سے sp مخلوط کا بننا (b) خطّی $BeCl_2$ سالمے کا بننا

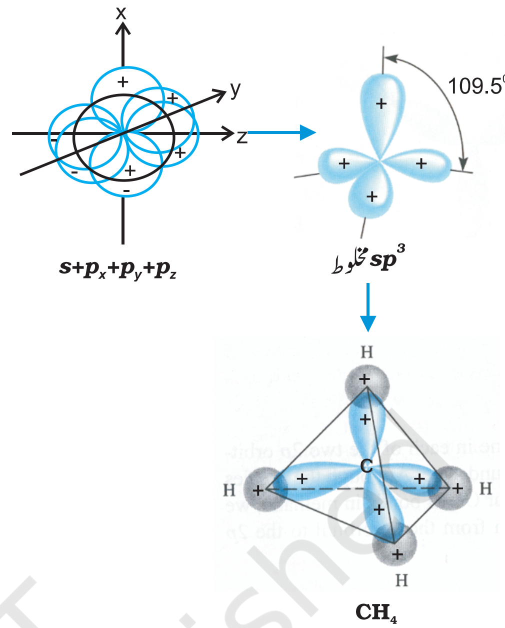
(II) sp^2 مخلوطیت: اس قسم کی مخلوطیت میں ایک s اور 2p اربٹل شامل ہوتے ہیں جو تین معادل مخلوط sp^2 اربٹل بناتے ہیں۔ مثال کے طور پر $BeCl_3$ سالمے میں مرکزی ایٹم بورون کا گراؤنڈ اسٹیٹ میں الیکٹرانی تشکل $1s^2\ 2s^2\ p^1$ ہوتا ہے۔ مشتعل حالت میں 2s کا ایک الیکٹران خالی 2p اربٹل میں چلا جاتا ہے جس کے نتیجے میں بورون کے پاس تین غیر جفتی الیکٹران ہو جاتے ہیں۔ یہ تین اربٹل (ایک 2s اور دو 2p) مل کر تین sp^2 مخلوط اربٹل بناتے ہیں۔ اس طرح بننے والے تین مخلوط اربٹل ٹرائی گونل پلینر ترتیب میں آجاتے ہیں اور کلورین کے 2p اربٹل سے مل کر تین B-Cl بند بناتے ہیں۔ لہٰذا BCl_3 کی جیومیٹری ٹرائی گونل پلینر ہوتی ہے اور ClBCl بندزاویہ 120° ہوتا ہے (شکل 4.11)۔



شکل 4.11 sp^3 مخلوط اربٹل اور BCl_3 سالمے کا بننا

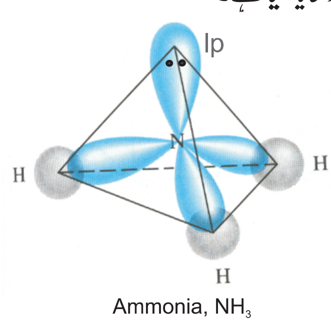
(III) sp^3 مخلوطیت: اس طرح کی مخلوطیت کی وضاحت کے لیے CH_4 کی مثال لی جا سکتی ہے جس میں ایک s اور تین p- اربٹل کی آمیزش سے چار sp^3 مخلوط اربٹل بنتے ہیں جن کی توانائی اور شکل یکساں ہوتی ہے۔ ہر ایک sp^3 اربٹل میں 25% s اور 75% p کردار شامل ہوتا ہے۔ اس طرح بننے والے چار sp^3 اربٹل چو سطحی شکل کے چاروں کونوں کی سمت ہوتے ہیں sp^3 مخلوط اربٹل کے درمیان 109.5° ہوتا ہے جیسا کہ شکل 4.12 میں دکھایا گیا ہے۔

NH_3 اور H_2O سالموں کی اشکال بھی sp^3 مخلوطیت کی مدد سے واضح کی جا سکتی ہیں۔ NH_3 سالمے میں نائٹروجن کا گراؤنڈ اسٹیٹ پر الیکٹرانی تشکل $2s^2\ 2p_x^1\ 2p_y^1\ 2p_z^1$ ہوتا ہے۔ جس میں سے تین sp^3 مخلوط اربٹل میں غیر جفتی الیکٹران ہوتے ہیں اور چوتھے میں ایک الیکٹرانوں کا تنہا جوڑا ہوتا ہے۔ یہ تین مخلوط اربٹل ہائڈروجن کے 1s اربٹل سے اوورلیپ کر کے تین N-H سگما بند بناتے ہیں۔ ہم جانتے ہیں کہ تنہا جوڑے اور بندشی جوڑے کے درمیان قوت دافعہ الیکٹران کے دو



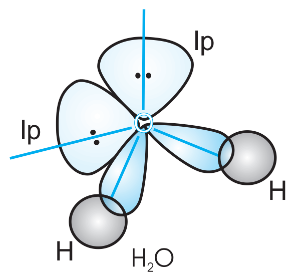
شکل 4.12 کاربن کے s، p_x، p_y اور p_z اربٹل کے اتحاد سے بننے والے sp^3 مخلوط اربٹل اور CH_4 کا بننا

بندشی جوڑوں کے درمیان قوت دافعہ سے زیادہ ہوتی ہے۔ اس طرح سالمہ کی شکل مسخ ہو جاتی ہے اور بند زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 107° ہو جاتا ہے۔ اس طرح کے سالموں کی جیومیٹری پیرامڈل ہوتی ہے جیسا کہ شکل 4.13 میں دکھایا گیا ہے۔



شکل 4.13 NH_3 سالمہ کا بننا

H_2O سالمہ میں آکسیجن کے چار اربٹل (ایک 2s اور تین 2p) میں sp^3 مخلوطیت ہوتی ہے اور چار sp^3 اربٹل بنتے ہیں جن میں سے دو اربٹل میں سے ہر ایک میں ایک الیکٹران ہوتا ہے اور باقی دو میں ایک ایک جوڑا الیکٹرانوں کا ہوتا ہے۔ یہ چار sp^3 مخلوط اربٹل چہار سطحی جیومیٹری حاصل کرتے ہیں۔ جس کے دو کونوں میں دو ہائڈروجن کے ایٹم ہوتے ہیں اور باقی دو کونوں میں غیر بندشی جوڑے ہوتے ہیں۔ اس میں بندشی زاویہ 109.5° سے گھٹ کر 104.5° ہو جاتا ہے (شکل 4.14) اور سالمہ V-شکل یا خمیدہ شکل اختیار کرتا ہے۔



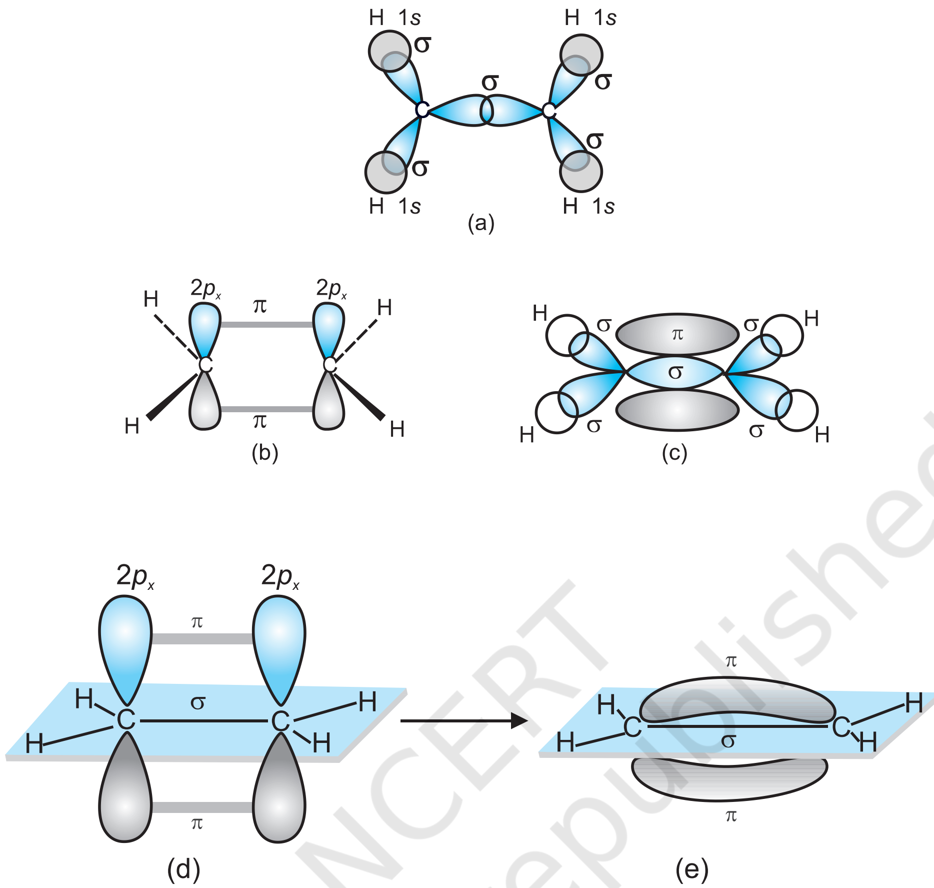
شکل 4.14 H_2O سالمہ کا بننا

4.6.2 sp^3، sp^2 اور sp مخلوطیت کی کچھ اور مثالیں

C_2H_6 سالمے میں sp^3 مخلوطیت: ایتھین کے سالمے میں دونوں کاربن ایٹموں میں sp^3 مخلوط حالت ہوتی ہے۔ کاربن ایٹم کے چار sp^3 مخلوط اربٹل میں سے ایک محوری طور پر دوسرے کاربن کے ایسے ہی اربٹل کے ساتھ اوورلیپ کرتا ہے اور ایک sp^3-sp^3 سگما بند بناتا ہے جبکہ ہر ایک کاربن کے تین مخلوط اربٹل ہائڈروجن ایٹم کے ساتھ sp^3-s سگما بند بناتے ہیں جیسا کہ 4.6.1 (iii) میں دکھایا گیا ہے۔ لہٰذا ایتھین میں C-C بندشی لمبائی 154 pm ہوتی ہے اور C-H بندشی لمبائی 109 pm ہوتی ہے۔

C_2H_4 میں sp^2 مخلوطیت: ایتھین سالمہ کے بننے میں ایک کاربن ایٹم کا ایک sp^2 مخلوط اربٹل دوسرے ایٹم کے sp^2 مخلوط اربٹل کے ساتھ محوری طور پر اوورلیپ کر کے C-C سگما بند بناتا ہے۔ جبکہ ہر ایک کاربن کے باقی دو sp^2 مخلوط اربٹل دو ہائڈروجن ایٹموں کے ساتھ sp^2-s سگما بند بناتے ہیں جبکہ ہر ایک کاربن کے باقی دو sp^2 مخلوط اربٹل دو ہائڈروجن ایٹموں کے ساتھ sp^2-s سگما بند بنانے میں استعمال ہوتے ہیں۔ ایک کاربن ایٹم کا غیر مخلوط اربٹل ($2p_x$ یا $2p_y$) دوسرے کاربن ایٹم کے مماثل اربٹل کے ساتھ پہلوی اوورلیپ کر کے ایک کمزور π بند بناتا ہے جو کاربن اور ہائڈروجن کی سطح کے اوپر اور نیچے دو مساوی الیکٹران بادلوں کی شکل میں رہتا ہے۔

اس طرح ایتھین سالمے میں کاربن-کاربن بانڈ میں ایک sp^2-sp^2 سگما بند ایک π بند ہوتا ہے جو p اربٹل کے درمیان ہوتا ہے جو مخلوطیت میں حصّہ نہیں لیتے اور سالمہ کی سطح کے عمودی ہوتے ہیں؛ بندشی لمبائی 134 pm ہوتی ہے۔ C-H بند sp^2-s ہوتا ہے جس کی بندشی

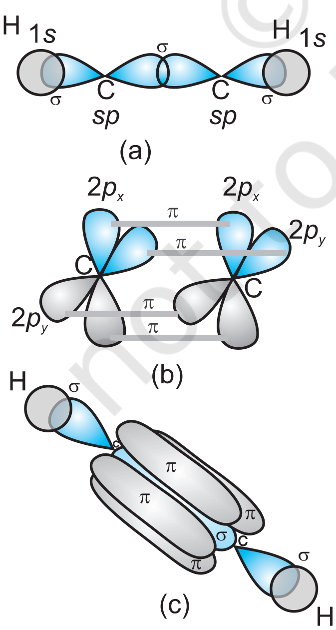


شکل 4.15 ایتھین میں سگما اور پائی بانڈ کا بننا

لمبائی 108 pm ہوتی ہے H-C-H بندشی زاویہ 117.6° جبکہ H-C-C بندشی زاویہ 121° ہوتا ہے۔ ایتھین میں سگما اور پائی بند کا بننا شکل 4.15 میں دکھایا گیا ہے۔

C_2H_2 میں *sp* مخلوطیت: ایتھائن کے سالمے کی تشکیل میں دونوں کاربن ایٹموں میں sp مخلوطیت ہوتی ہے اور دو غیر مخلوط اربٹل، یعنی $2p_y$ اور $2p_x$ ہوتے ہیں۔

ایک کاربن ایٹم کا sp مخلوط اربٹل دوسرے کاربن ایٹم کے sp مخلوط اربٹل کے ساتھ محوری اوورلیپ کر کے C-C سگما بند بناتے ہیں جبکہ ہر ایک کاربن کا دوسرا مخلوط اربٹل محوری سطح پر ہائڈروجن ایٹم کے نصف بھرے ہوئے s اربٹل پر اوورلیپ کر کے σ بند بناتا ہے۔ دونوں کاربن ایٹموں کے دو غیر مخلوط p اربٹل جانبی اوورلیپ کر کے کاربن ایٹموں کے درمیان دو π بند بناتے ہیں۔ اس طرح دو کاربن ایٹموں کے درمیان تہرے بند میں ایک سگما اور دو پائی بند ہوتے ہیں جیسا کہ شکل 4.16 میں دکھایا گیا ہے۔



شکل 4.16 ایتھائن میں سگما اور پائی بند کا بننا

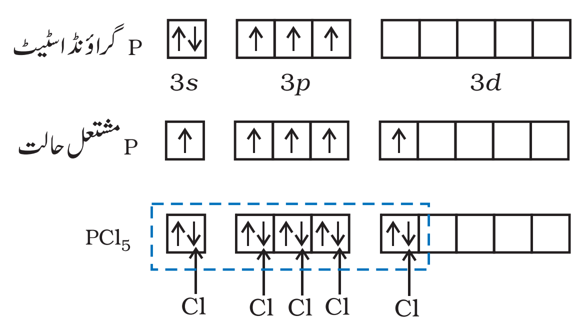
4.6.3 ‏d-اربٹل والے عناصر میں مخلوطیت
(Hybridisation of Elements Involving *d* Orbitals)

تیسرے دور میں پائے جانے والے عناصر میں s- اور p- کے علاوہ d-اربٹل ہوتے ہیں 3d اربٹل کی توانائی کا موازنہ 3s اور 3p اربٹل سے کیا جاسکتا ہے۔3d- اربٹل کی توانائی کا موازنہ 4s اور 4p سے بھی کیا جاسکتا ہے۔نتیجہ کے طور پر3s، 3p اور 3d یا3d، 4s اور 4p کے درمیان مخلوطیت ممکن ہوسکتی ہے۔ تاہم چونکہ 3p اور 4s اربٹل کے درمیان توانائی کا فرق بامعنی ہوتا ہے، لہٰذا3p، 3d اور 4s اربٹل کے ساتھ مخلوطیت ممکن نہیں ہوتی۔

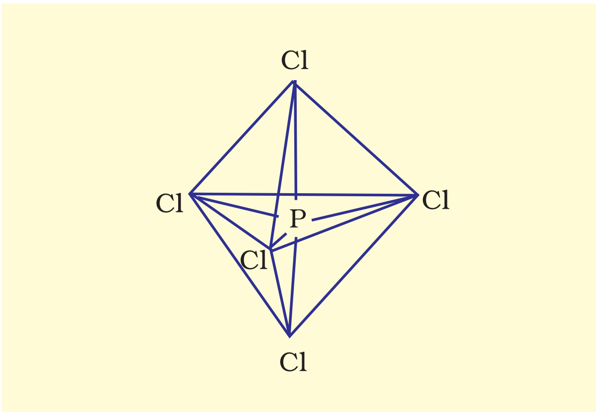
s،p اور d-اربٹل کے ساتھ مخلوطیت کی اسکیم کا خلاصہ مندرجہ ذیل ہے:

سالموں/آینوں کی شکل	مخلوطیت کی قسم	ایٹمی اربٹل	مثالیں
مربع سطحی (Square Planar)	dsp^2	d+s+p(2)	$[Ni(CN)_4]^{2-}$, $[Pt(Cl)_4]^{2-}$
ٹرائی گونل بائی پیرامڈل (Trigonal Bipyramidal)	sp^3d	s+p(3)+d	PF_5, PCl_5
اسکوائر پیرامڈل (Suqare Pyramidal)	dsp^3	d+s+p(3)	BrF_5, $XeOF_4$
آکٹا ہیڈرل	sp^3d^2 d^2sp^3	s+p(3)+d(2) d(2)+s+p(3)	SF_6, $[CrF_6]^{3-}$ $[Co(NH_3)_6]^{3+}$

(i) PCl_5 کا بنا (sp^3d مخلوطیت): فاسفورس کی گراوَنڈ اسٹیٹ اور مشتعل حالت کا بیرونی الیکٹرانی تشکل (Z = 15) مندرجہ ذیل ہے۔



sp^3d مخلوط اربٹل پانچ کلورین ایٹموں کے ذریعہ فراہم کرائے گئے الیکٹرانوں سے بھرے ہوئے



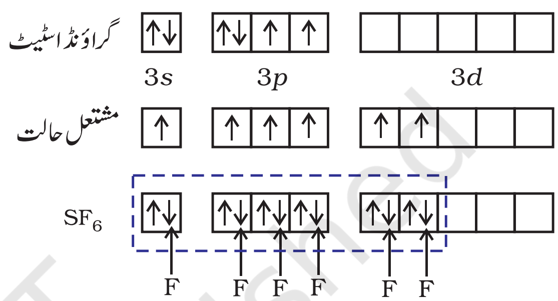
شکل 4.17 PCl_5 سالمہ کی ٹرائی گونل بائی پیرامڈل جیومیٹری

اب پانچ اربٹل (یعنی ایک s، تین p اور ایک d اربٹل) مخلوطیت کے لیے دستیاب ہیں جو sp^3d مخلوط اربٹل کو بنائیں گے جو کہ ٹرائی گونل بائی پیرامڈل کے پانچ کونوں کی سمت میں ہوں گے جیسا کہ شکل 4.17 میں دکھایا گیا ہے۔

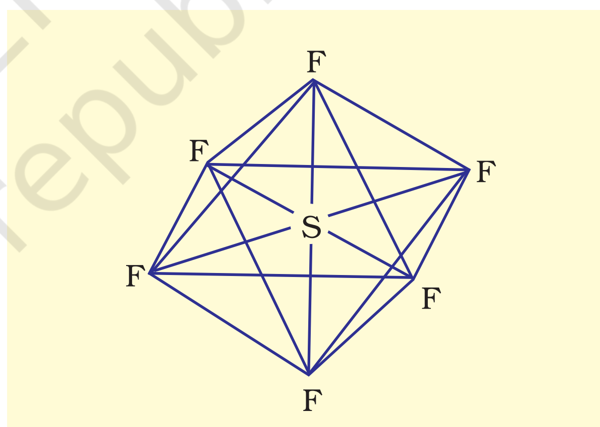
یہ دیکھنا چاہیے کہ ٹرائی گونل بائی پیرامڈل جیومیٹری میں تمام زاویے برابر نہیں ہوتے۔ PCl_5 میں فاسفورس کے پانچ sp^3d مخلوط اربٹل کلورین ایٹم کے p اربٹل، جس میں صرف ایک الیکٹران ہوتا ہے سے اوورلیپ کرکے پانچ P-Cl سگما بند بناتے ہیں۔ تین P-Cl بند ایک ہی سطح پر ہوتے ہیں اور ایک دوسرے سے 120° کا زاویہ بناتے ہیں۔ ان بند کو استوائی بند (Equatorial Bond) کہتے ہیں۔ باقی کے دو P-Cl بند استوائی سطح کے اوپر اور نیچے سطح کے ساتھ 90° کا زاویہ بناتے ہوئے ہوتے ہیں۔ انھیں محوری بند کہتے ہیں۔ چونکہ محوری بند کے جوڑے استوائی بند کے جوڑوں کی طرف سے زیادہ دافع قوت برداشت کرتے ہیں۔ لہٰذا محوری بند، استوائی بند کے مقابلے میں تھوڑے سے لمبے اور کمزور پائے ہوتے ہیں جس کی وجہ سے PCl_5 زیادہ متعامل ہوتا ہے۔

(ii) SF_6 کا بننا ($sp^3\ d^2$ مخلوطیت): SF_6 میں مرکزی ایٹم سلفر کا گراوَنڈ اسٹیٹ میں الیکٹرانی تشکل $3s^2\ 3p^4$ ہے۔ مشتعل حالت میں دستیاب چھ اربٹل یعنی، ایک s، تین p- اور دو d- اربٹل میں ایک ایک

الیکٹران ہوتا ہے۔ یہ اربٹل مخلوطیت کے بعد چھ نئے $sp^3 d^2$ مخلوط اربٹل بناتے ہیں جو SF_6 میں باقاعدہ آکٹاہیڈرن کے چھ کونوں کی سمت ہوتے ہیں۔ یہ چھ sp^3d^3 مخلوط اربٹل فلورین ایٹم کے ایک الیکٹران سے گھرے ہوئے ہوتے ہیں اربٹل پر اوورلیپ کرکے چھ S-F سگما بند بناتے ہیں۔ اس طرح SF_6 سالمے کی ایک باقاعدہ آکٹاہیڈرن شکل ہوتی ہے جیسا کہ شکل 4.18 میں دکھائی گئی ہے۔



sp^3d^2 مخلوطیت



شکل 4.18 SF_6 سالمہ کی آکٹا ہیڈرل جیومیٹری

4.7 مولیکیولر اربٹل تھیوری (Molecular Orbital Theory)

مولیکولر اربٹل نظریہ 1932 میں ایف۔ ہُنڈ اور آر۔ ایس۔ مُلیکن نے تیار کیا تھا۔ اس نظریہ کی خصوصیات مندرجہ ذیل ہیں:

(i) ایک سالمہ میں الیکٹران مختلف مالیکولر اربٹل میں پائے جاتے ہیں اسی طرح جیسے ایک ایٹم میں الیکٹران ایٹمی اربٹل میں پائے جاتے ہیں۔

(ii) قابل موازنہ توانائی اور مناسب تشاکل کے ایٹمی اربٹل آپس میں مل کر مولیکیولر اربٹل بناتے ہیں۔

(iii) ایک ایٹمی اربٹل میں الیکٹران ایک نیوکلیس کے زیر اثر ہے، جبکہ مالیکولر اربٹل میں وہ دو یا دو سے زیادہ نیوکلیس اثر میں رہتا ہے اس کا انحصار سالمے میں موجود ایٹموں کی تعداد پر ہوتا ہے۔ لٰہذا ایٹمی اربٹل اکائی مرکزی ہوتا ہے جبکہ مالیکولر اربٹل کثیر مرکزی ہوتا ہے۔

(iv) بننے والے مولیکیولر اربٹل کی تعداد متحد ہونے والے ایٹمی اربٹل کی تعداد کے برابر ہوتی ہے۔ جب دو ایٹمی اربٹل متحد ہوتے ہیں تو دو مولیکیو کر اربٹل بنتے ہیں۔ ایک **بونڈنگ مولیکولر اربٹل** اور دوسرا **اینٹی بونڈنگ اربٹل** کہلاتا ہے۔

(v) بندشی مولیکولر اربٹل کی توانائی کم ہوتی ہے لٰہذا متعلقہ اینٹی بونڈنگ مولیکلر اوربٹل سے اس کا استحکام زیادہ ہوتا ہے۔

(vi) جس طرح ایک ایٹم میں مرکز کے گرد الیکٹرانوں کا احتمالی بٹاؤ ایک ایٹمی اربٹل سے ظاہر کیا جاتا ہے اسی طرح ایک سالمہ میں مرکزوں کے گروہ کے گرد الیکٹرانوں کا احتمالی بٹاؤ مولیکولر اوربٹل کے ذریعہ دیا جاتا ہے۔

(viii) ایٹمی اربٹل کی طرح مولیکیولر اربٹل بھی پالی کے اصول اخراج اور ہُنڈ کے قانون کا اتباع کرتے ہوئے آف باؤ کے اصول کے مطابق ہی بھرے جاتے ہیں۔

4.7.1 مولیکیولر آربٹل کا بننا ایٹمی اربٹل کا خطّی اتحاد (Formation of Molecular Orbitals Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO)

لہر میکانیات (Wave Mechanics) کے مطابق ایٹمی اربٹل کو لہر تفاعل (ψ) سے ظاہر کرتے ہیں جو الیکٹران لہروں کی وسعت کو ظاہر کرتا ہے۔ انہیں شروڈنجر کی لہر مساوات کے حل سے حاصل کیا جاتا ہے۔ تاہم، چونکہ یہ کسی ایسے نظام کے لیے حل نہیں کی جاسکتی جس میں ایک سے زیادہ الیکٹران ہوں، مولیکیولر اوربٹل جو سالموں کے لیے ایک الیکٹران لہر فنکشن ہوتے ہیں انہیں براہِ راست شروڈنجر کی لہر مساوات کے حل سے حاصل کرنا مشکل ہوتا ہے۔ اس مسئلہ پر قابو پانے کے لیے ایک تقریبی طریقہ استعمال کیا گیا جو **ایٹمی اربٹل کا خطی اتحاد** (Linear Combination of Atomic Orbital) کہلاتا ہے۔

آیئے اس طریقہ کو ہومونیوکلیر دو ایٹمی ہائڈروجن سالمے کے لیے استعمال کرتے ہیں۔ مان لیجیے ہائڈروجن سالمہ دو ایٹم A اور B سے مل کر بنا ہے۔ ہر ایک ہائڈروجن ایٹم اپنی گراؤنڈ اسٹیٹ میں 1s اربٹل میں ایک الیکٹران ہوتا ہے۔ ان ایٹموں کے ایٹمی اربٹل لہر فنکشن ψ_A اور ψ_B سے ظاہر کیے جاسکتے ہیں۔ ریاضیاتی طور پر مالیکیولر اربٹل مالیکیولر اربٹل کا بننا ایٹمی اربٹل کے خطّی اتحاد سے ظاہر کیا جاسکتا ہے جو منفرد ایٹمی اربٹل کے لہر فنکشن کے جمع اور گھٹا کرنے سے حاصل ہوسکتا ہے جیسا کہ نیچے دکھایا گیا ہے۔

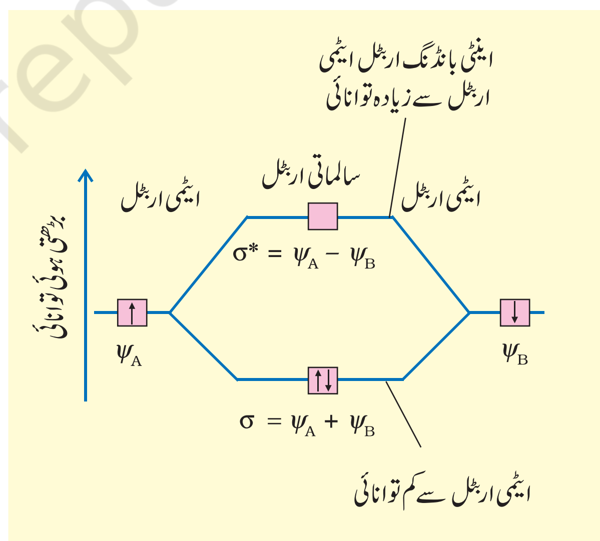
$$\psi_{MO} = \psi_A \pm \psi_B$$

لہٰذا σ اور σ* دو مالیکیولر اربٹل اس طرح بنیں گے۔

$$\sigma = \psi_A + \psi_B$$

$$\sigma^* = \psi_A - \psi_B$$

سالماتی اربٹل σ جو ایٹمی اربٹل کے جمع کرنے سے بنا ہے وہ **بندشی مالیکیولر اربٹل** (Bonding Molecular Orbital) کہلاتا ہے جبکہ سالماتی اربٹل σ* جو ایٹمی اربٹل کی تفریق سے بنتا ہے وہ **اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل** کہلاتا ہے۔ جیسا کہ شکل 4.19 میں دکھایا گیا ہے۔



شکل 4.19 دو ایٹم A اور B کے مرکز پر ایٹمی اربٹل ψ_A اور ψ_B کے خطّی اتحاد سے بننے والے بانڈنگ (σ) اور اینٹی بانڈنگ (σ*) مولیکیولر اربٹل کا بننا

کیفیتی طور پر، سالماتی اربٹل کا بننا اتحادی ایٹموں کی الیکٹرانی لہروں کی تعمیری اور تخریبی تداخل (Constructive and Distructive Interference) کی اصطلاحات میں سمجھا جاسکتا ہے۔ بانڈنگ مالیکیولر اربٹل کے بننے میں بندشی ایٹموں کی دو الیکٹران لہریں ایک دوسرے کو تعمیری تداخل کے سبب تقویت پہنچاتی ہیں جبکہ اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل کے بنے میں الیکٹران لہریں تخریبی تداخل کی وجہ سے ایک دوسرے کو رَد کر دیتی ہیں۔ نتیجہ کے طور پر بانڈنگ مالیکیولر اربٹل کی الیکٹران کثافت اتحادی ایٹموں کے مرکزوں کے درمیان قائم رہتی ہے جس کی وجہ سے نیوکلیس کے درمیان دفع بہت کم ہوتا ہے جبکہ اینٹی بانڈنگ مولیکیولر اربٹل میں زیادہ تر الیکٹران کثافت کے درمیان کی جگہ سے دور ہوتے ہیں۔ دراصل مرکزوں کے درمیان ایک نوڈل مستوی ہوتا ہے (جس پر الیکٹران کثافت صفر ہوتی ہے) جس کی وجہ سے نیوکلیس کے درمیان قوت دافعہ زیادہ ہوتی ہے۔ گرفتی مالیکیولر اربٹل میں موجود الیکٹران مرکزوں کو ایک ساتھ تھامے رہتے ہیں جس کی وجہ سے سالمہ مستحکم ہو جاتا ہے۔ لہٰذا ایک گرفتی مالیکیولر اربٹل میں ہمیشہ ان دونوں ایٹمی اربٹل سے کم توانائی ہوتی ہے جن سے مل کر وہ بنتے ہیں۔ اس کے برعکس وہ الیکٹران جو انٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں ہوتے ہیں وہ سالمہ کو غیر مستحکم کرتے ہیں۔ یہ اس وجہ سے ہوتا ہے کہ اس اربٹل میں الیکٹرانوں کی آپسی قوت دافعہ الیکٹرانوں اور نیوکلیس کے درمیان کشش سے زیادہ ہوتی ہے جس کی وجہ سے کل توانائی میں اضافہ ہوتا ہے۔

یہ بات قابلِ غور ہے کہ اینٹی بانڈنگ اربٹل کی توانائی ان ایٹمی اربٹل سے اوپر اٹھ جاتی ہے جن اربٹل سے مل کر وہ بنتے ہیں جبکہ بندشی اربٹل کی توانائی ان سے نیچے گر جاتی ہے جو ان کے بنانے والے ہیں۔ تاہم، دونوں مالیکیولر اربٹل کی کُل توانائی اتنی ہی رہتی ہے جتنی کہ ابتدائی دو ایٹمی اربٹل کی ہوتی ہے۔

4.7.2 ایٹمی اربٹل کے اتحاد کی شرائط (Conditions for the Combination of Atomic Orbitals)

مالیکیولر اربٹل بنانے کے لیے ایٹمی اربٹل کا خطّی اتحاد اسی وقت ممکن ہے جبکہ مندرجہ ذیل شرائط پوری ہوسکیں۔

1۔ اتحادی ایٹمی اربٹل کی توانائی تقریباً یکساں ہونی چاہیے۔ اس کا مطلب یہ ہے کہ 1s اربٹل 1s اربٹل کے ساتھ ہی اتحاد کرسکتا ہے لیکن 2s کے ساتھ نہیں کیونکہ 2s- اربٹل کی توانائی 1s- اربٹل سے

خاصی زیادہ ہوتی ہے۔ یہ اس وقت درست نہیں ہوگا جب ایٹم بہت مختلف ہوں گے۔

2۔ متحد ہونے والے ایٹمی اربٹل کا تشاکل سالمی محور کے برابر ہونا چاہیے۔ روایت کے مطابق z- محور کو سالماتی محور کے طور پر لیا جاتا ہے۔ یہ بات قابلِ غور ہے کہ برابر اور تقریباً برابر توانائی والے ایٹمی اربٹل بھی اتحاد نہیں کرتے ہیں اگر ان کا تشاکل برابر نہ ہو۔ مثال کے طور پر کسی ایٹم کے $2p_z$ اربٹل دوسرے ایٹم کے $2p_z$ اربٹل کے ساتھ ہی اتحاد کریں گے نہ کہ $2p_x$ یا $2p_y$ سے کیونکہ ان کا تشاکل مختلف ہے۔

3۔ متحد ہونے والے ایٹمی اربٹل کا اوورلیپ زیادہ سے زیادہ ہونا چاہیے۔ جتنا زیادہ اوورلیپ ہوگا مالیکیولر اربٹل کے مرکزوں کے درمیان اتنی ہی زیادہ الیکٹران کثافت ہوگی۔

4.7.3 مالیکیولر اربٹل کی قسمیں (Types of Molecular Orbitals)

دوایٹمی سالمات کے مالیکیولر اربٹل کو σ (سگما) π (پائی) اور δ (ڈیلٹا) سے ظاہر کرتے ہیں۔

اس تسمیہ میں 'سگما (σ) **مالیکیولر اربٹل بند-محور کے گرد تشاکلی ہوتے ہیں جبکہ پائی (π) مالیکیولر اربٹل تشاکلی نہیں ہوتے۔**' مثال کے طور پر 1s- اربٹل کا خطی اتحاد جو دو مرکزوں کے گرد ہوتا ہے اور دو مالیکیولر اربٹل بناتا ہے جو بند-محور کے گرد تشاکلی ہوتے ہیں۔ ایسے مالیکیولر اربٹل σ قسم کے ہوتے ہیں اور ان کو σ1s اور 1s *σ سے ظاہر کرتے ہیں (شکل (4.20(a))۔ '**اگر بین مرکزی محور z- سمت میں لیا جائے تو یہ دیکھا جاسکتا ہے کہ دوایٹموں کے 2pz اربٹل کا خطی اتحاد بھی دو سگما مالیکیولر اربٹل بناتا ہے جن کو $\sigma 2p_z$ اور σ^*2p_z سے ظاہر کرتے ہیں (شکل (4.20(b))۔**

$2p_x$ اور $2p_y$ سے حاصل ہونے والے مالیکیولر اربٹل بانڈ-محور کے گرد تشاکلی نہیں ہوتے کیونکہ سالماتی سطح کے اوپر مثبت لوب اور نیچے منفی لوب ہوتا ہے۔ ایسے مالیکیولر اربٹل کو π اور *π سے ظاہر کرتے ہیں (شکل(4.20 (c))۔ π- بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں بین مرکزی محور کے اوپر اور نیچے الیکٹران- کثافت زیادہ ہوتی ہے۔ *π اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں مرکزوں کے درمیان نوڈ ہوتی ہے۔

4.7.4 مالیکیولر اربٹل کے انرجی لیول ڈائیگرام (Energy Level Diagram for Molecular Orbitals)

ہم نے دیکھا کہ دوایٹموں کے 1s ایٹموں اربٹل دو مالیکیولر اربٹل σ1s اور σ1s* بناتے ہیں۔ اسی طرح 2s اور 2p ایٹمی اربٹل (دوایٹموں پر آٹھ ایٹمی اربٹل) مل کر مندرجہ ذیل آٹھ مالیکیولر اربٹل دیتے ہیں۔

$\sigma^*2s \quad \sigma^*2p_z \quad \pi^*2p_x \quad \pi^*2p_y$ اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل

$\sigma 2s \quad \sigma 2p_z \quad \pi 2p_x \quad \pi 2p_y$ بانڈنگ مولیکیولر اربٹل

ان مالیکیولر اربٹل کے انرجی لیول دوری جدول کی دوسری قطار کے عناصر کے متجانس دو ایٹمی سالموں کے تجرباتی طور پر حاصل شدہ اسپیکٹر واسکوپک اعداد وشار کی مدد سے معلوم کیے گئے ہیں۔ O_2 اور F_2 کے مختلف مالیکیولر اربٹل کی توانائی کی بڑھتی ہوئی ترتیب مندرجہ ذیل ہے:

$$\sigma 1s < \sigma^*1s < \sigma 2s < \sigma^*2s < \sigma 2p_z < (\pi 2p_x = \pi 2p_y)$$
$$< (\pi^*2p_x = \pi^*2p_y) < \sigma^*2p_z$$

تاہم مالیکیولر اربٹل کی توانائی کے درجات کی یہ ترتیب باقی سالموں، Li_2، Be_2، B_2، C_2، N_2 کے لیے صحیح نہیں ہے۔ مثال کے طور پر تجرباتی طور پر یہ دیکھا گیا ہے کہ B_2، C_2، N_2 وغیرہ جیسے سالمات کے لیے مختلف مالیکیولر اربٹل کے لیے توانائی کی بڑھتی ہوئی ترتیب مندرجہ ذیل ہے۔

$$\sigma 1s < \sigma^*1s < \sigma 2s < \sigma^*2s < (\pi 2p_x = \pi 2p_y)$$
$$< \sigma 2p_z < (\pi^*2p_x = \pi^*2p_y) < \sigma^*2p_z$$

اس ترتیب کی اہم خصوصیت یہ ہے کہ **$\sigma 2p_z$ مالیکیولر اربٹل کی توانائی $\pi 2p_x$ اور $\pi 2p_y$ مالیکیولر اربٹل سے زیادہ ہے۔**

4.7.5 الیکٹرانی تشکل اور سالماتی طرز عمل (Electronic Configuration and Molecular Behaviour)

مختلف مالیکیولر اربٹل میں الیکٹرانوں کا بٹاؤ سالمے کا **الیکٹرانی تشکل** کہلاتا ہے۔ سالمے کے الیکٹرانی تشکل سے یہ ممکن ہے کہ سالمے سے متعلق اہم معلومات حاصل کی جاسکیں جیسا کہ نیچے بیان کیا گیا ہے۔

سالموں کا استحکام: اگر بانڈنگ اربٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد N_b ہے اور اینٹی بانڈنگ اربٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد N_a ہے تو:

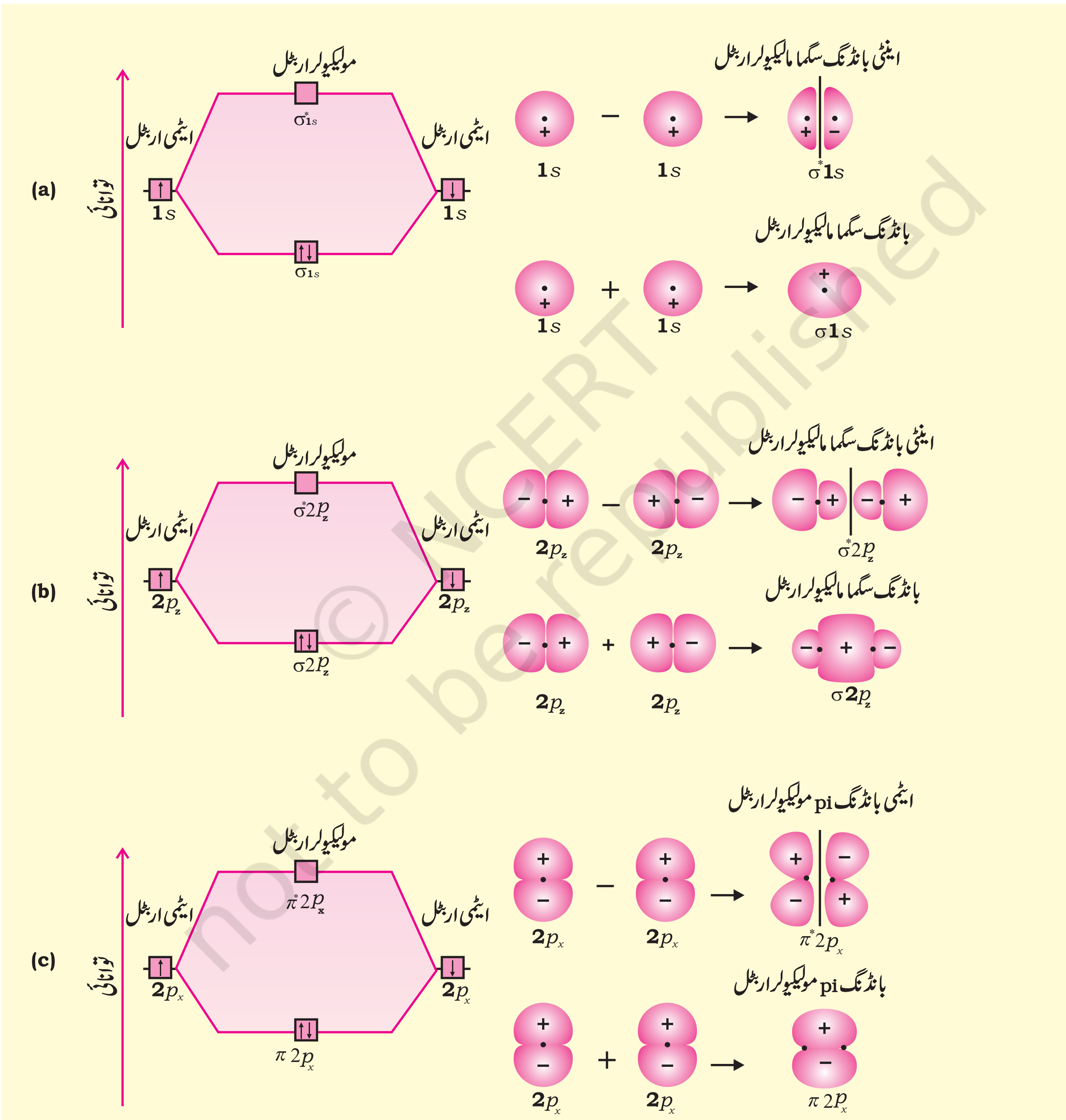
(i) اگر N_b، N_a سے زیادہ ہے تو سالمہ مستحکم ہوگا اور

(ii) سالمہ غیر مستحکم ہوگا اگر N_b، N_a سے کم ہے۔

(i) میں زیادہ بانڈنگ اربٹل بھرے ہوئے ہیں لہٰذا بانڈنگ کا اثر زیادہ ہوگا اور سالمہ مستحکم ہوگا۔ (ii) اینٹی بانڈنگ اربٹل کا اثر زیادہ ہے لہٰذا سالمہ غیر مستحکم ہوگا۔

بانڈ آرڈر *(Bond Order)*

بونڈ آرڈر (BO) کی تعریف اس طرح بیان کی جاسکتی ہے کہ یہ بانڈنگ اور اینٹی بانڈنگ اربٹل میں موجود الیکٹرانوں کی تعداد میں فرق کے آدھے کی برابر ہوتا ہے۔یعنی



شکل 4.20 (a) $1s$- ایٹمی اربٹل، (b) $2p_z$ ایٹمی اربٹل اور (c) $2p_x$ ایٹمی اربٹل کے اتحاد سے بننے والے بانڈنگ اور اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل کی توانائیاں اور خدوخال

$(BO) = \frac{1}{2}(N_b - N_a)$

سالموں کی استحکام سے متعلق اوپر بیان کیے گئے اصولوں کو بانڈ آرڈر کی اصطلاحات میں مندرجہ ذیل طریقہ سے دوبارہ بیان کیا جاسکتا ہے۔ ایک مثبت بانڈ آرڈر (یعنی $N_b > N_a$) یا صفر (یعنی $N_a = N_b$) کا مطلب ہے غیر مستحکم سالمہ۔

بند کی فطرت *(Nature of the Bond)*

بانڈ آرڈر کی تکملی قیمتیں 1، 2 یا 3 اکہرے، دوہرے یا تہرے بند کو ظاہر کرتی ہیں جیسا کہ ہم نے کلاسیکی تصور میں پڑھا تھا۔

بندشی لمبائی *(Bond-length)*

ایک سالمہ میں دو ایٹموں کے درمیان بانڈ آرڈر کو بندشی لمبائی کی قریبی پیمائش کے طور پر لیا جاسکتا ہے جب بانڈ آرڈر بڑھتا ہے تو بندشی لمبائی کم ہوتی ہے۔

مقناطیسی فطرت *(Magnetic Nature)*

اگر کسی سالمے میں تمام مالیکیولر آربٹل دوہرے (یا دو الیکٹرانوں سے) گھرے ہوئے ہیں تو وہ شے ڈایا مقناطیسی (Diamagnetic) ہوگی (مقناطیسی میدان سے مدافعت کرے گی)۔ بہر حال اگر ایک یا زیادہ مالیکیولر آربٹل میں اکہرے الیکٹران ہیں تو وہ پیرامیگنیٹک (Paramagnetic) ہوگی (مقناطیسی میدان کے تئیں کشش رکھے گی)۔ مثال کے طور پر O_2 کا سالمہ۔

4.8 ہم نیوکلیائی دوایٹمی سالموں میں بندش (Bonding in Some Homonuclear Diatomic Molecules)

اس سیکشن میں ہم کچھ ہم نیوکلیائی دوایٹمی سالموں میں بندش پر بحث کریں گے۔

1. ہائڈروجن سالمہ (H_2): یہ دو ہائڈروجن ایٹموں کے ملنے سے بنتا ہے۔ ہر ایک ہائڈروجن ایٹم کے 1s اربٹل میں ایک الیکٹران ہوتا ہے۔ لہٰذا، ہائڈروجن کے سالمہ میں کُل دو الیکٹران ہوتے ہیں جو σ1s مالیکیولر آربٹل میں موجود ہوتے ہیں۔ لہٰذا ہائڈروجن سالمے کا الیکٹرانی تشکل ہوتا ہے:

$$H_2 : [\sigma 1s]^2$$

ہائڈروجن سالمے H_2 کا بانڈ آرڈر مندرجہ ذیل طریقے سے معلوم کیا جاسکتا ہے۔

$$\text{بانڈ آرڈر} = \frac{N_b - N_a}{2} = \frac{2-0}{2} = 1$$

اس کا مطلب ہے کہ ہائڈروجن کے دو ایٹم آپس میں اکہرے بند سے بندھے ہوئے ہوتے ہیں۔ ہائڈروجن سالمے کی بند افتراق توانائی $438\ kJ\ mol^{-1}$ معلوم کی گئی ہے اور بندشی لمبائی 74 pm ہے۔ چونکہ ہائڈروجن کے سالمے میں کوئی بھی بغیر جوڑے والا الیکٹران نہیں ہے لہٰذا یہ ڈایا مقناطیسی ہوتا ہے۔

2. ہیلیم سالمہ (He): ہیلیم ایٹم کا الیکٹرانی تشکل $1s^2$ ہے۔ ہیلیم کے ہر ایک ایٹم میں دو الیکٹران ہوتے ہیں لہٰذا ہیلیم کے سالمہ میں چار (4) الیکٹران ہوں گے۔ یہ الیکٹران σ1s اور σ*1s مالیکیولر آربٹل میں ہوتے ہیں جس کی وجہ سے الیکٹرانی تشکل مندرجہ ذیل ہوتا ہے۔

$$He_2 : (\sigma 1s)^2\ (\sigma^* 1s)^2$$

ہیلیم کا بانڈ آرڈر ہوگا $\frac{1}{2}(2-2) = 0$

He_2 سالمہ لہٰذا غیر مستحکم ہے اور پایا نہیں جاتا۔

اسی طرح یہ بھی دکھایا جاسکتا ہے کہ Be_2 سالمہ $(\sigma 1s)^2\ (\sigma^* 1s)^2\ (\sigma 2s)^2\ (\sigma^* 2s)^2$ بھی نہیں پایا جاتا۔

3. لیتھیم سالمہ (Li_2): لیتھیم کا الیکٹرانی تشکل $1s^2$، $2s^1$ ہے Li_2 میں چھ الیکٹران ہیں۔ لہٰذا Li_2 سالمہ کا الیکٹرانی تشکل، $Li_2 : (\sigma 1s)^2\ (\sigma^* 1s)^2\ (\sigma 2s)^2$ ہوگا۔

مندرجہ بالا تشکل کو اس طرح بھی لکھ سکتے ہیں $KK[\sigma 2s]^2$، جہاں KK بند K شیل $(\sigma 1s)^2\ (\sigma^* 1s)^2$ کو ظاہر کرتے ہیں۔

Li_2 کے الیکٹرانی تشکل سے یہ بات ظاہر ہے کہ بانڈنگ مالیکیولر آربٹل میں چار الیکٹران موجود ہیں اور دو الیکٹران اینٹی بانڈنگ مالیکیولر آربٹل میں موجود ہیں۔ لہٰذا اس کا بانڈ آرڈر، $1 = \frac{1}{2}(4 - 2)$ ہے۔ اس کا مطلب ہے کہ Li_2 سالمہ مستحکم ہے اور چونکہ اس کے پاس غیر جوڑے کے الیکٹران نہیں ہیں لہٰذا یہ ڈایا مقناطیسی ہوگا۔ درحقیقت ڈایا مقناطیسی Li_2 سالمے بخارات کی شکل میں پائے جاتے ہیں۔

4. کاربن سالمہ (C_2): کاربن کا الیکٹرانی تشکل $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ ہے۔ C_2 میں بارہ الیکٹران ہوتے ہیں۔ لہٰذا، C_2 سالمہ کا الیکٹرانی تشکل:

$$C_2 : (\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x^2 = \pi 2p_y^2)$$

یا $KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\pi 2p_x^2 = \pi 2p_y^2)$

کاربن کا بانڈ آرڈر $2 = \frac{1}{2}(8 - 4)$ ہے اور C_2 ڈایا مقناطیسی ہونا چاہیے۔ حقیقت میں بخارات کی شکل میں C_2 سالمے پائے گئے ہیں۔ یہ بات نوٹ کرنے لائق ہے کہ C_2 میں دوہرا بند دونوں پائی بند پر مشتمل ہوتا ہے کیونکہ دو پائی مالیکیولر اربٹل میں چار الیکٹران موجود ہوتے ہیں۔ دوسرے زیادہ تر سالموں کے دوہرے بند میں ایک سگما اور دوسرا پائی بند ہوتا ہے۔ اسی طریقے سے N_2 سالمے میں بندش پر بحث کی جاسکتی ہے۔

5. آکسیجن سالمہ (O_2) : آکسیجن ایٹم کا الیکٹرانی تشکل $1s^2\,2s^2\,2p^4$ ہے۔ ہر ایک آکسیجن ایٹم کے پاس 8 الیکٹران ہیں لہذا O_2 سالمہ میں 16 الیکٹران ہوں گے۔ O_2 سالمہ کا الیکٹرانی تشکل اس طرح

$$O_2:\ (\sigma 1s)^2(\sigma^* 1s)^2(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p_z)^2 \left(\pi 2p_x^{\,2} \equiv \pi 2p_y^{\,2}\right)\left(\pi^* 2p_x^{\,1} \equiv \pi^* 2p_y^{\,1}\right)$$

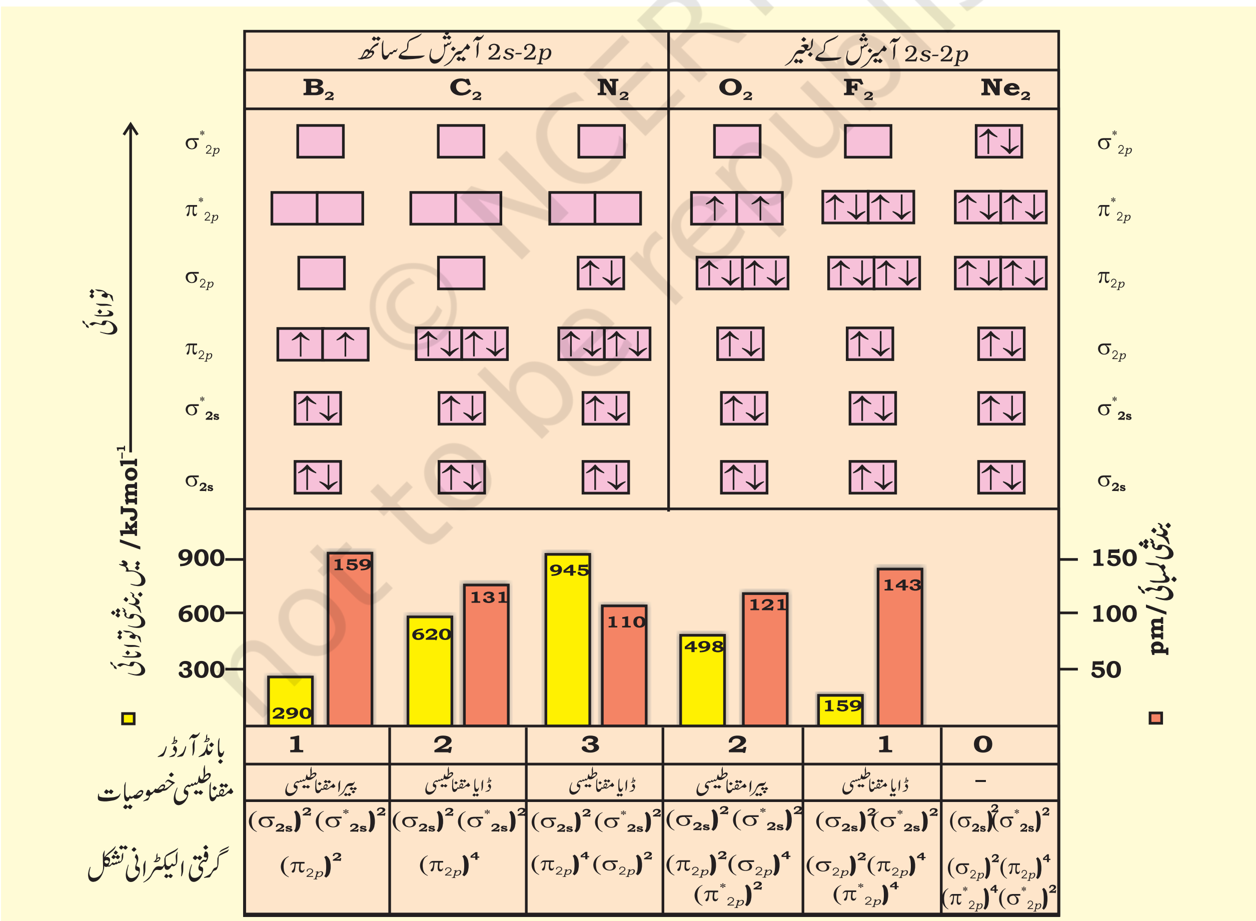
$$O_2:\ \left[\begin{array}{c} KK(\sigma 2s)^2(\sigma^* 2s)^2(\sigma 2p_z)^2 \\ \left(\pi 2p_x^2 \equiv \pi 2p_y^2\right),\left(\pi^* 2p_x^1 \equiv \pi^* 2p_y^1\right) \end{array}\right]$$

ہوگا۔

O_2 سالمے کے الیکٹرانی تشکل سے یہ واضح ہوتا ہے کہ بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں 10 (دس) الیکٹران موجود ہیں اور 6 الیکٹران اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں موجود ہیں۔ لہٰذا اس کا

$$\text{بونڈ آرڈر} = \frac{1}{2}[N_b - N_a] = \frac{1}{2}[10 - 6] = 2$$

لہٰذا آکسیجن کے سالمے میں ایٹم دوہرے بند سے بندھے ہوئے ہوتے ہیں۔ اس کے علاوہ یہ بھی دیکھا گیا ہے کہ اس کے پاس دو بغیر جوڑے کے الیکٹران π^*2p_x اور π^*2p_y مالیکیولر اربٹل میں موجود ہیں۔ **لہٰذا O_2 سالمہ، ایک پیرا مقناطیسی سالمہ ہونا چاہیے۔ ایک اندازہ جس کی تصدیق تجرباتی مشاہدہ سے ہوتی ہے۔ اس طرح یہ نظریہ آکسیجن کی پیرا مقناطیسی فطرت کی کامیابی کے ساتھ وضاحت کرتا ہے۔**



شکل 4.21 B_2 سے Ne_2 تک عناصر کے لیے MO کے بھرائو اور سالمی خصوصیات

اسی طرح دوری جدول کے دوسرے دور کے عناصر کے دوسرے ہم نیوکلیائی دو ایٹمی سالموں کے الیکٹرانی تشکل بھی لکھے جاسکتے ہیں۔ شکل 4.21 میں B_2 سے Ne_2 تک عناصر کی سالمی خصوصیات اور مالیکیولر اربٹل کا بھراؤ دیا گیا ہے۔ مالیکیولر اربٹل کی ترتیب اور ان کے الیکٹرانوں کی تعداد دکھائی گئی ہے۔ بندشی توانائی، بندشی لمبائی، بانڈ آرڈر، مقناطیسی خصوصیات اور بندشی الیکٹران تشکل آربٹل ڈائیگرام کے نیچے دکھائے گئے ہیں۔

4.9 ہائڈروجن بندش (Hydrogen Bonding)

نائٹروجن، آکسیجن اور فلورین انتہائی الیکٹران منفی عناصر ہیں۔ جب یہ شریک گرفت بند بنانے کے لیے ہائڈروجن کے ساتھ جڑتے ہیں تو شریک بندش بند کے الیکٹران زیادہ الیکٹران منفی عنصر کی سمت کھسک جاتے ہیں۔ یہ جُزوی مثبت چارج والے ہائڈروجن دوسرے زیادہ الیکٹرونگیٹو ایٹم کے ساتھ ایک بند بناتے ہیں۔ اس بند کو ہائڈروجن بند کہتے ہیں اور یہ شریک گرفت بند سے کمزور ہوتا ہے۔ مثال کے طور پر HF سالمے میں ایک سالمے کے ہائڈروجن ایٹم اور دوسرے سالمے کے فلورین ایٹم کے درمیان ہائڈروجن بند ہوتا ہے جیسا کہ ذیل میں دکھایا گیا ہے۔

$$---H^{\delta+} - F^{\delta-} --- H^{\delta+} - F^{\delta-} --- H^{\delta+} - F^{\delta-}$$

یہاں ہائڈروجن بند ایک پُل کی طرح کام کرتا ہے جو ایک ایٹم کو شریک گرفت بونڈ کے ذریعہ اور دوسرے ایٹم کو ہائڈروجن بند کے ذریعہ باندھے رکھتا ہے۔

ہائڈروجن بند کو ٹوٹی ہوئی لائن (- - -) سے ظاہر کرتے ہیں جبکہ ایک ٹھوس لائن شریک بندش بند کو ظاہر کرتی ہے۔ **لہٰذا ہائڈروجن بند کی تعریف ہم اس طرح کر سکتے ہیں کہ یہ وہ قوت کشش ہے جو ایک سالمے کے ہائڈروجن ایٹم کو دوسرے سالمے کے برقی منفی ایٹم (F، O یا N) سے باندھتی ہے۔**

4.9.1 ہائڈروجن بند بننے کی وجوہات (Cause of Formation of Hydrogen Bond)

جب ہائڈروجن ایک بہت زیادہ برقی منفی عنصر X کے ساتھ جڑتا ہے تو دونوں ایٹموں کے درمیان مشترک الیکٹرانوں کا جوڑا ہائڈروجن سے دور ہو جاتا ہے جس کے نتیجہ میں ہائڈروجن دوسرے عنصر X کے مقابلے میں بہت زیادہ برقی مثبت ہو جاتا ہے۔ چونکہ الیکٹران X کی سمت کھسک جاتے ہیں لہٰذا ہائڈروجن پر ایک جزوی مثبت چارج آجاتا ہے (δ^+) جبکہ X پر جزوی منفی چارج (δ^-) آجاتا ہے۔ اس کے نتیجے میں قطبی سالمہ بنتا ہے جس میں برقی سکونی قوتِ کشش ہوتی ہے اور جسے مندرجہ ذیل طریقہ سے ظاہر کرتے ہیں۔

$$H^{\delta+} - X^{\delta-} --- H^{\delta+} - X^{\delta-} --- H^{\delta+} - X^{\delta-}$$

ہائڈروجن بند کی قدر مرکب کی طبیعی حالت پر منحصر ہوتی ہے۔ یہ ٹھوس حالت میں سب سے زیادہ ہوتی ہے اور گیسی حالت میں سب سے کم۔ اس طرح ہائڈروجن بند مرکب کی ساخت اور اس کی خصوصیات پر بہت زیادہ اثر ڈالتا ہے۔

4.9.2 H- بند کی قسمیں (Types of H-Bonds)

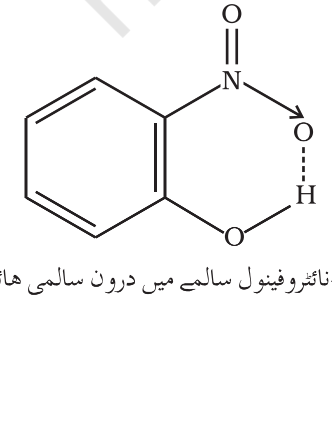
H- بند دو قسم کے ہوتے ہیں

(i) بین سالمی ہائڈروجن بند (Intermolecular Hydrogen Bond)

(ii) درون سالمی ہائڈروجن بند (Intramolecular Hydrogen Bond)

(I) بین سالمی ہائڈروجن بند: یہ کسی ایک یا مختلف مرکب کے دو مختلف سالموں کے درمیان بنتے ہیں: مثال کے طور پر HF سالمے، الکوحل یا H_2O وغیرہ کے سالموں میں H بند۔

(II) درون سالمی ہائڈروجن بند: یہ اس وقت بنتے ہیں جب ہائڈروجن دو بہت زیادہ برقی منفی (F, O, N) ایٹموں کے درمیان ہو جو ایک ہی سالمے کے اندر ہوں۔ مثال کے طور پر O- نائٹرو فینول میں ہائڈروجن، دو آکسیجن کے ایٹموں کے درمیان ہوتی ہے (شکل 4.20)۔



شکل 4.20 O-نائٹروفینول سالمے میں درون سالمی ہائڈروجن بندش

خلاصہ

برقی مثبت اور برقی منفی آینوں کے بننے کے عمل میں کوسیل کی پہلی بصیرت کا تعلق آینوں کے ذریعہ نوبل گیس تشکل حاصل کرنے کے عمل سے تعلق رکھتا ہے۔ آینوں کے درمیان برقی سکونی کشش ان کے استحکام کا سبب ہوتی ہے۔ اس نے **برقی گرفت** کے تصور کو پیدا کیا۔

شریک گرفت بندش کا پہلا بیان لیوئس نے دو ایٹموں کے درمیان الیکٹران جوڑے کی شرکت کی اصطلاح میں دیا تھا اور اس نے الیکٹرانوں کے اشتراک کے نتیجے میں متعامل ایٹموں کے نوبل گیس تشکل حاصل کرنے کے عمل کے درمیان تعلق بتایا ہے۔ لیوئس کی نقطہ علامات (Lewis Dot Symbol) ایک دیے ہوئے عنصر کے گرفتی الیکٹرانوں کی تعداد کو ظاہر کرتے ہیں اور لیوئس نقطہ ساختیں سالموں میں بندش کا تصویری اظہار ہیں۔

ایک آینی مرکب کی شکل مثبت اور آینوں کے ایک باترتیب سہ ابعادی مجموعہ کی شکل میں ہوتی ہے جسے کرسٹل لیٹس (Crystal Latice) کہتے ہیں۔ **قلمی** ٹھوس میں مثبت اور منفی آینوں کے درمیان ایک چارج کا توازن ہوتا ہے۔ **قلمی جالی لیٹس تشکیل کی اینتھالپی** کے ذریعہ مستحکم ہوتی ہے۔

ایک اکہرا شریک گرفت بند دو ایٹموں کے درمیان ایک الیکٹران جوڑے کے اشتراک سے بنتا ہے، کثیر بند الیکٹرانوں کے دو یا تین جوڑوں کے اشتراک سے بنتے ہیں کچھ عناصر میں الیکٹرانوں کے اضافی جوڑے ہوتے ہیں جو بندش میں حصہ نہیں لیتے۔ ان کو الیکٹرانوں کے تنہا جوڑے کہتے ہیں۔ لیوئس ڈاٹ ساخت سالموں کے ہر ایک ایٹم کے گرد بندشی جوڑے اور تنہا جوڑے کی ترتیب کو دکھاتی ہے۔ **کیمیائی بندش سے تعلق رکھنے والے اہم پیرامیٹر جیسے: بندشی لمبائی، بندشی زاویہ، بند اینتھالپی، بانڈ آرڈر اور بند قطبیت مرکبات کی خصوصیات پر بامعنی اثرات رکھتے ہیں۔**

سالمات اور کثیر ایٹمی آینوں کی ایک بڑی تعداد ایک لیوئس ساخت سے ظاہر نہیں کی جاسکتی اور یکساں ساختی ڈھانچہ کی بنیاد پر کئی تفصیلات لکھی جاتی ہیں اور یہ سب مل کر سالمہ یا آین کو ظاہر کرتے ہیں۔ یہ ایک بہت اہم اور انتہائی مفید تصور ہے جو **گمک (Resonance)** کہلاتا ہے۔ یہ اشتراکی ساختیں یا مستند شکلیں ایک ساتھ مل کر گمک مخلوط بناتی ہیں جو سالمہ یا آین کو ظاہر کرتی ہے۔

وی ایس ای پی آر (VSEPR) ماڈل کا استعمال سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی پیشین گوئی کے لیے کیا جاتا ہے جس کی بنیاد وہ مفروضہ ہے کہ الیکٹران کے جوڑے ایک دوسرے کو دھکیلتے ہیں اور ایک دوسرے سے زیادہ سے زیادہ ممکنہ فاصلے پر رہنے کی کوشش کرتے ہیں۔ اس ماڈل کے مطابق "سالمی جیومیٹری لون پیئر–لون پیئر، لون پیئر–بونڈنگ پیئر اور بونڈنگ پیئر–بونڈنگ پیئر کے درمیان دفع کی بنیاد پر طے کی جاتی ھے" ان دافع قوتوں کی ترتیب کا تسلسل اس طرح ہوتی ہے؛ lp-lp > lp-bp > bp-bp

شریک گرفت بندش کے لیے **گرفت بند طرز رسائی (Valence Bond Approach)** کا بنیادی تعلق دراصل شریک گرفت بند بننے کے لیے درکار توانائیوں سے ہے جس کے متعلق لیوئس اور ویسپار ماڈل خاموش ہیں۔ بنیادی طور پر وی بی نظریہ بند بننے کے عمل پر ارٹبل کے انطباق (Overlap) کی اصطلاح میں بحث کرتا ہے۔ مثال کے طور پر دو H ایٹم سے H_2 سالمے کی تشکیل میں دونوں H ایٹم کے 1s ارٹبل کے انطباق شامل ہیں جن میں ایک ایک الیکٹران موجود ہے۔ یہ دیکھا گیا ہے کہ جیسے جیسے دونوں ہائڈروجن ایٹم ایک دوسے کے نزدیک آتے ہیں تو اس نظام کی مضمر توانائی کم ہوجاتی ہے۔ بین مرکزی متوازن فاصلے بندشی فاصلے پر یہ توانائی کم سے کم ہوجاتی ہے۔ ان نیوکلیس کو مزید قریب لانے کی کوشش توانائی میں فوری اضافہ کردے گی اور سالمہ کو غیر مستحکم بنادے گی۔ انطباق کی وجہ سے نیوکلیس کے درمیان الیکٹران کی کثافت بڑھ جاتی ہے جو دونوں مرکزوں کو نزدیک لانے میں مدد کرتی ہے۔ تاہم یہ دیکھا گیا ہے کہ اصل بانڈ اینتھالپی اور بندشی لمبائی کی قدریں محض انطباق سے حاصل نہیں ہوتیں بلکہ دوسرے متغیروں کو بھی اس میں شامل کرنا لازمی ہے۔

کثیر ایٹمی سالموں کی مخصوص شکل کی وضاحت کے لیے پالنگ نے **ایٹمی ارٹبل کی مخلوطیت** کا تصور پیش کیا تھا $BeCl_2$، BCl_3، CH_4، NH_3 اور H_2O جیسے سالموں کی جیومیٹریائی اشکال کی وضاحت کے لیے Be، B، C، N اور O کے ایٹمی ارٹبل کی sp، sp^2 اور sp^2 **مخلوطیت کا استعمال** کیا گیا تھا۔ یہ C_2H_4 اور C_2H_2 جیسے سالموں میں کثیر بند کے بننے کی بھی وضاحت کرتے ہیں۔

مالیکیولر اربٹل کا نظریہ (Molecular Orbital Theroy, MO) ایٹمی اربٹل کی ترتیب اور اتحاد کی اصطلاح میں مالیکیولر اربٹل کے بننے کی وضاحت کرتا ہے جو کسی سالمے سے مکمل طور پر وابستہ ہوتے ہیں۔ مالیکیولر اربٹل کی تعداد ہمیشہ ان ایٹمی اربٹل کے برابر ہوتی ہے جن سے مل کر وہ بنتے ہیں۔ بانڈنگ مالیکیولر اربٹل نیوکلیس کے درمیان الیکٹران کثافت کو بڑھاتے ہیں اور ان کی توانائی انفرادی ایٹمی اربٹل سے کم ہوتی ہے۔ اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں نیوکلیس کے درمیان صفر الیکٹران کثافت کا علاقہ ہوتا ہے اور ان کی توانائی انفرادی ایٹمی اربٹل سے زیادہ ہوتی ہے۔

سالموں کا الیکٹرانی تشکل مالیکیولر اربٹل میں ان کی بڑھتی ہوئی توانائی کی ترتیب میں الیکٹرانوں کو بھرتے ہوئے لکھا جاتا ہے۔ جیسا کہ ایٹموں میں ہوتا ہے، مالیکیولر اربٹل میں بھی الیکٹرانوں کو بھرنے کے لیے پالی کا اصول اخراج (Paulis Exclusion Principle) اور ہُنڈ کا قانون استعمال ہوتا ہے۔ سالمے اس وقت مستحکم کہے جاسکتے ہیں جب گرفتی مالیکیولر اربٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد اینٹی بانڈنگ مالیکیولر اربٹل میں الیکٹرانوں کی تعداد سے زیادہ ہوتی ہے۔

ہائڈروجن بند اس وقت بنتا ہے جب ہائڈروجن اپنے آپ کو دو بہت زیادہ برق منفی ایٹم، جیسے F، O اور N کے درمیان پاتی ہے۔ یہ بین سالمی (ایک ہی یا مختلف اشیاء کے دو یا دو سے زیادہ سالموں کے درمیان موجود رہتی ہے) یا درون سالمی (ایک ہی سالمے میں موجود ہوتی ہے) ہوسکتی ہے۔ ہائڈروجن بونڈ بہت سے مرکبات کی اشکال اور خصوصیات پر گہرا اثر رکھتے ہیں۔

مشقیں

4.1 کیمیائی بندش کی تشکیل کی وضاحت کیجیے۔

4.2 مندرجہ ذیل عناصر کے ایٹوں کے لیے لیوس ڈاٹ علامات لکھیے:

Mg, Na, B, O, N, Br

4.3 مندرجہ ذیل ایٹموں اور آینوں کے لیے لیوئس علامات لکھیے:

S اور S^{2-}؛ Al اور Al^{3+}؛ H اور H^-

4.4 مندرجہ ذیل سالموں اور آینوں کے لیے لیوئس اشکال بنائیے:

H_2S، $SiCl_4$، BeF_2، CO_3^{2-}، HCOOH۔

4.5 آکٹیٹ قاعدے کی تعریف بیان کیجیے۔ اس کی اہمیت اور حدود لکھیے۔

4.6 آینی بندش بننے کے لیے موافق عوامل لکھیے۔

4.7 VSEPR ماڈل کا استعمال کرتے ہوئے مندرجہ ذیل سالموں کی اشکال پر بحث کیجیے:

$BeCl_2$، BCl_3، $SiCl_4$، AsF_5، H_2S، PH_3

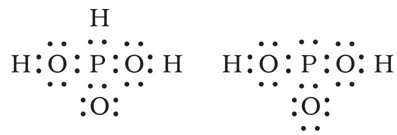
4.8 اگرچہ NH_3 اور H_2O سالموں کی جیومیٹری مسخ شدہ ٹیٹراہیڈرل ہے پانی میں بندشی زاویہ NH_3 سے کم ہے۔ بحث کیجیے۔

4.9 بانڈ آرڈر کی اصطلاح میں آپ بندشی لمبائی کو کیسے ظاہر کریں گے۔

4.10 بندشی لمبائی کی تعریف بیان کیجیے۔

4.11 CO_3^{2-} آین کے حوالے سے گمک کے اہم پہلوؤں کی وضاحت کیجیے۔

4.12 H_3PO_3 کی مندرجہ ذیل اشکال 1 اور 2 سے ظاہر کیا جاسکتا ہے۔ کیا ان دونوں شکلوں کو H_3PO_3 ظاہر کرنے والی گمک مخلوط کی معیاری اشکال مان سکتے ہیں؟ اگر نہیں تو اس کے لیے وجہ بتائیں۔



(1) (2)

4.13 SO_3، NO_2 اور NO_3^- کے لیے گمک ساختیں بنایئے۔

4.14 مندرجہ ذیل ایٹموں میں کیٹائن اور اینائن بنانے کے لیے الیکٹرانوں کی منتقلی کو دکھانے کے لیے لیوئس علامات کا استعمال کیجیے:

(a) K اور S (b) Ca اور O (c) A1 اور N

4.15 اگرچہ CO_2 اور H_2O سالمے کی شکل خمیدہ اور CO_2 کی خطی ہے۔ ڈائپول مومنٹ کی بنیاد پر وضاحت کیجیے۔

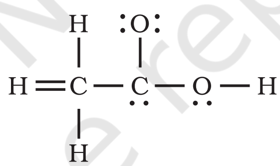
4.16 ڈائپول مومنٹ کی اہمیت/استعمال لکھیے۔

4.17 برقی منفیت کی تعریف بیان کیجیے۔ یہ الیکٹران گین اینتھالپی (Electron Gain Enthalpy) سے کس طرح مختلف ہوتی ہے۔

4.18 قطبی شریک گرفت بندش کی وضاحت مناسب مثالوں کے ذریعہ کیجیے۔

4.19 مندرجہ ذیل سالمات میں بند کو ان کے بڑھتے ہوئے آینی کردار کی ترتیب میں لکھیے LiF، K_2O، N_2، SO_2 اور ClF_3

4.20 CH_3COOH کی نیچے دی گئی ڈھانچہ ساخت صحیح ہے، لیکن کچھ بند غلط جگہوں پر دکھائے گئے ہیں ایسیٹک ایسڈ کے لیے صحیح لیوئس ساخت لکھیے۔



4.21 ٹیٹراہیڈرل جیومیٹری کے علاوہ CH_4 کی دوسری ممکنہ جیومیٹری مربع سطحی (Square Planer) شکل بھی ہے جس میں مربع کے چار کونوں میں چار ہائڈروجن اور کاربن مرکز میں ہوسکتا ہے۔ CH_4 مربع سطحی کیوں نہیں ہے؟ وضاحت کیجیے۔

4.22 BeH_2 کا ڈائپول مومنٹ صفر کیوں ہے جبکہ Be–H بند قطبی ہوتے ہیں؟ وضاحت کیجیے۔

4.23 NH_3 اور NF_3 میں سے کس کا ڈائپول مومنٹ زیادہ ہوگا اور کیوں؟

4.24 ایٹمی اربٹل کی مخلوطیت سے آپ کیا سمجھتے ہیں؟ sp، sp^2 اور sp^3 مخلوط اربٹل کی شکل بیان کیجیے۔

4.25 مندرجہ ذیل تعامل میں A1 ایٹم کی مخلوطیت میں تبدیلی (اگر کوئی ہے تو) بتایئے۔

$$AlCl_3 + Cl^- \rightarrow AlCl_4^-$$

4.26 مندرجہ ذیل تعامل کے نتیجے میں کیا B اور N ایٹموں کی مخلوطیت میں کوئی تبدیلی ہے؟

$$BF_3 + NH_3 \rightarrow F_3B.NH_3$$

4.27 تصویر کی مدد C_2H_2 اور C_2H_4 سالموں میں دوہرے اور تہرے بند بنتے ہوئے دکھایئے۔

4.28 مندرجہ ذیل سالموں میں کل سگما اور پائی بند کی تعداد بتائیے۔

(a) C_2H_2 (b) C_2H_4

4.29 X- محور کو بین مرکزی محور سمجھتے ہوئے بتائیے کہ مندرجہ ذیل میں سے کون سگما بند نہیں بنائے گا اور کیوں؟

(a) 1s اور 1s (b) 1s اور 2p (c) $2p_y$ اور $2p_y$ (d) 1s اور 2s

4.30 مندرجہ ذیل سالموں میں کاربن ایٹم کے ذریعہ کون سے مخلوط اربٹل استعمال کیے گئے ہیں؟

(a) CH_3-CH_3 (b) $CH_3-CH=CH_2$ (c) CH_3-CH_2-OH (d) CH_3-CHO

(e) CH_3COOH

4.31 بونڈ پیئر الیکٹران اور لون پیئر الیکٹران سے آپ کیا سمجھتے ہیں؟ ہر ایک کی ایک ایک مثال دے کر سمجھائیے۔

4.32 سگما اور پائی بانڈ میں فرق بتائیے۔

4.33 ویلنس بانڈ تھیوری کی بنیاد پر H_2 سالمے کی بننے کی وضاحت کیجیے۔

4.34 مالیکیولر اربٹل بنانے کے لیے ایٹمی اربٹل کے خطّی اتحاد کے لیے لازمی حالات لکھیے۔

4.35 مالیکیولر آربٹل تھیوری کی بنیاد پر واضح کیجیے کہ Be_2 سالمہ کیوں نہیں پایا جاتا؟

4.36 مندرجہ ذیل نسبتی استحکام کا مقابلہ کیجیے اور ان کی مقناطیسی خصوصیات ظاہر کیجیے۔

O_2 ، O_2^+ ، O_2^- (سُپر آکسائڈ)، O_2^{2-} (پرآکسائڈ)

4.37 اربٹل کے اظہار میں منفی اور مثبت اشاروں کی اہمیت بتائیے۔

4.38 PCl_5 میں مخلوطیت کو بیان کیجیے۔ استوائی بانڈ کے مقابلے میں محوری بانڈ کیوں لمبے ہوتے ہیں۔

4.39 ہائڈروجن بانڈ کی تعریف بیان کیجیے۔ یہ ون ڈر والز قوتوں کے مقابلے زیادہ قوی ہوتا ہے یا کمزور؟

4.40 اصطلاح بانڈ آرڈر سے کیا مراد ہے؟ N_2 ، O_2 ، O_2^+ اور O_2^- کا بانڈ آرڈر معلوم کیجیے۔